

PCT/JP 00/06887

JP 00/6887  
EU

日本国特許庁  
PATENT OFFICE  
JAPANESE GOVERNMENT

03.10.00

別紙添付の書類に記載されている事項は下記の出願書類に記載されている事項と同一であることを証明する。

This is to certify that the annexed is a true copy of the following application as filed with this Office.

出願年月日

Date of Application:

1999年10月 8日

REC'D 17 NOV 2000

出願番号

Application Number:

平成11年特許願第288691号

WIPO

PCT

出願人

Applicant (s):

理化学研究所  
科学技術振興事業団

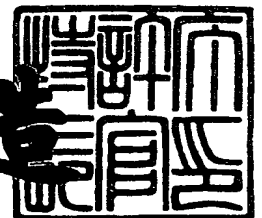
PRIORITY  
DOCUMENT

SUBMITTED OR TRANSMITTED IN  
COMPLIANCE WITH RULE 17.1(a) OR (b)

2000年11月 6日

特許庁長官  
Commissioner,  
Patent Office

及川耕造



出証番号 出証特2000-3089983

【書類名】 特許願

【整理番号】 12147401

【提出日】 平成11年10月 8日

【あて先】 特許庁長官殿

【国際特許分類】 C07B 1/00

【発明の名称】 分子の立体化学コード化方法

【請求項の数】 12

【発明者】

【住所又は居所】 埼玉県和光市広沢 2 番 1 号 理化学研究所内

【氏名】 越 野 広 雪

【発明者】

【住所又は居所】 埼玉県和光市本町 3 - 1 3 - 4 0 8

【氏名】 佐 藤 寛 子

【発明者】

【住所又は居所】 埼玉県和光市広沢 2 番 1 号 理化学研究所内

【氏名】 中 田 忠

【特許出願人】

【識別番号】 000006792

【住所又は居所】 埼玉県和光市広沢 2 番 1 号

【氏名又は名称】 理化学研究所

【特許出願人】

【識別番号】 396020800

【住所又は居所】 埼玉県川口市本町 4 丁目 1 番 8 号

【氏名又は名称】 科学技術振興事業団

【代理人】

【識別番号】 100064285

【弁理士】

【氏名又は名称】 佐 藤 一 雄

【選任した代理人】

【識別番号】 100091982

【弁理士】

【氏名又は名称】 永 井 浩 之

【選任した代理人】

【識別番号】 100096895

【弁理士】

【氏名又は名称】 岡 田 淳 平

【手数料の表示】

【予納台帳番号】 004444

【納付金額】 21,000円

【提出物件の目録】

【物件名】 明細書 1

【物件名】 図面 1

【物件名】 要約書 1

【プルーフの要否】 要

【書類名】 明細書

【発明の名称】 分子の立体化学コード化方法

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

分子を構成する複数の原子の個々の原子の回りの立体化学を取り入れて分子をコード化する分子の立体化学コード化方法であって、

着目するスタート原子を最低階位として第 0 階位に分類し、前記スタート原子と高階位側で結合する原子を第 1 階位に分類し、前記第 1 階位の原子と高階位側で結合する原子を第 2 階位に分類し、同様に、所望により設定する最終の階位に至るまで順々に原子を階位に分類する階位分類工程と、

同じ階位に属する複数の原子を互いに順位付けするための所定の優先順位規則を設定し、階位毎に同じ階位に属する原子を前記優先順位規則に従って順位付けして順位配列し、前記複数の原子の間の結合関係を表すように低階位から高階位に向かって分子ツリー体を前記スタート原子毎に形成する分子ツリー体形成工程と、

前記分子ツリー体において、 $n$  を 0 以上の整数とするとき各々の整数  $n$  について、第  $(n+3)$  階位に分類された一つの原子に着目し、着目する第  $(n+3)$  階位の原子と、前記第  $(n+3)$  階位の原子に結合される第  $(n+2)$  階位の原子と、前記第  $(n+2)$  階位の原子に結合される第  $(n+1)$  階位の原子と、前記第  $(n+1)$  階位の原子に結合される第  $n$  階位の原子の 4 個の原子からなるグループに対し、前記第  $(n+3)$  階位の原子と、前記第  $(n+2)$  階位の原子と、及び前記第  $(n+1)$  階位の原子で形成される平面と、前記第  $(n+2)$  階位の原子、前記第  $(n+1)$  階位の原子、及び前記第  $n$  階位の原子で形成される平面との間の二面角を求め、求めた前記二面角をその大きさに応じて所定の角度分割規則に従って定義した角度記号に置換し、置換された前記角度記号を前記着目する第  $(n+3)$  階位の原子に記号付与し、同様に、他の着目する原子に対し二面角の大きさに応じて角度記号を記号付与する記号化工程と、

前記分子ツリー体を一系列の文字列で表記するための所定の線形表記規則を設定し、前記所定の線形表記規則に従って複数の前記角度記号からなる集合を前記分

子ツリー体に対応させて線形表記して、前記スタート原子に対して分子の立体配座を表す立体配座コードを作成し、同様に、他のスタート原子に対し立体配座コードを作成する立体配座コード作成工程と、  
を備えることを特徴とする分子の立体化学コード化方法。

【請求項 2】

分子の立体配置を表す立体配置コードを前記スタート原子毎に作成する立体配置コード作成工程をさらに備え、

前記立体配置コード作成工程は、  
着目する第  $n$  階位の原子を前記角度分割規則の基準位置に位置させ、第  $(n+3)$  階位に属する原子の中で前記優先順位規則に従い所定優先度を有する原子が前記基準位置に対し所定角度位置に位置するように、前記第  $(n+3)$  階位に属する原子を一体的に第  $(n+1)$  階位の原子と第  $(n+2)$  階位の原子とを結ぶ結合軸の回りに回転させ、前記基準位置に対する回転後の角度位置に応じて前記第  $(n+3)$  階位に属する原子の各々に前記角度分割規則に従う角度記号を記号付与し、

前記所定の線形表記規則に従って複数の前記角度記号からなる集合を前記分子ツリー体に対応させて線形表記して、前記立体配置コードを前記スタート原子毎に作成することを特徴とする請求項 1 に記載の分子の立体化学コード化方法。

【請求項 3】

分子の平面構造を表す平面構造コードを前記スタート原子毎に作成する平面構造コード作成工程をさらに備え、

前記平面構造コード作成工程は、  
前記分子ツリー体を前記複数の原子の間の結合関係を平面構造的に表記する平面構造記号の集合で表し、前記所定の線形表記規則に従って複数の前記平面構造記号からなる集合を前記分子ツリー体に対応させて線形表記して、前記スタート原子に対して分子の平面構造を表す平面構造コードを作成し、同様に、他のスタート原子に対し平面構造コードを作成することを特徴とする請求項 2 に記載の分子の立体化学コード化方法。

【請求項 4】

前記スタート原子に対し、前記立体配座コードと前記立体配置コードと前記平面構造コードとが並記して表示されることを特徴とする請求項 3 に記載の分子の立体化学コード化方法。

【請求項 5】

前記第  $(n+3)$  階位に属する原子を第  $(n+1)$  階位の原子と第  $(n+2)$  階位の原子とを結ぶ結合軸の回りに回転させることが不能である場合には、前記記号化工程で記号付与した角度記号をそのまま採用し、前記所定の線形表記規則に従って複数の前記角度記号からなる集合を前記分子ツリー体に対応させて線形表記して、前記立体配置コードを前記スタート原子毎に作成することを特徴とする請求項 2 に記載の分子の立体化学コード化方法。

【請求項 6】

前記平面構造コードは、キャノスト線形表記であることを特徴とする請求項 3 に記載の分子の立体化学コード化方法。

【請求項 7】

前記優先順位規則は、キャノストコード優先順位規則であることを特徴とする請求項 1 に記載の分子の立体化学コード化方法。

【請求項 8】

前記所定の線形表記規則は、キャノストコード線形表記規則であることを特徴とする請求項 1 に記載の分子の立体化学コード化方法。

【請求項 9】

前記分子ツリー体形成工程において、立体化学を識別する上で着目性の低い原子群を所定記号に置換しマスキングすることを特徴とする請求項 1 に記載の分子の立体化学コード化方法。

【請求項 10】

前記所定の角度分割規則は、

360度の角度を時計時刻目盛状に所定数に分割し、分割された角度範囲は存在性の高低を反映して不等分であることを特徴とする請求項 1 に記載の分子の立体化学コード化方法。

【請求項 11】

前記立体配座コード作成工程において、階位数が3階位以上離れた少なくとも2個の前記スタート原子に対して前記立体配座コードが作成されることを特徴とする請求項1に記載の分子の立体化学コード化方法。

【請求項12】

分子を構成する複数の原子の個々の原子の回りの立体化学を取り入れて分子をコード化するためのプログラムを記録したコンピュータ読み取り可能な記録媒体であって、

着目するスタート原子を第0階位に分類し、前記スタート原子と高階位側で結合する原子を第1階位に分類し、前記第1階位の原子と高階位側で結合する原子を第2階位に分類し、同様にして、所望により設定する最終の階位に至るまで順々に原子を階位に分類する階位分類工程と、

同じ階位に属する複数の原子を互いに順位付けするための所定の優先順位規則を設定し、階位毎に同じ階位に属する原子を前記優先順位規則に従って順位付けして順位配列し、前記複数の原子の間の結合関係を表すように低階位から高階位に向かって分子ツリー体を前記スタート原子毎に形成する分子ツリー体形成工程と、

前記分子ツリー体において、 $n$ を0以上の整数とするとき各々の整数 $n$ について、第 $(n+3)$ 階位に分類された一つの原子に着目し、着目する第 $(n+3)$ 階位の原子と、前記第 $(n+3)$ 階位の原子に結合される第 $(n+2)$ 階位の原子と、前記第 $(n+2)$ 階位の原子に結合される第 $(n+1)$ 階位の原子と、前記第 $(n+1)$ 階位の原子に結合される第 $n$ 階位の原子の4個の原子からなるグループに対し、前記第 $(n+3)$ 階位の原子と、前記第 $(n+2)$ 階位の原子と、及び前記第 $(n+1)$ 階位の原子で形成される平面と、前記第 $(n+2)$ 階位の原子、前記第 $(n+1)$ 階位の原子、及び前記第 $n$ 階位の原子で形成される平面との間の二面角を求め、求めた前記二面角をその大きさに応じて所定の角度分割規則に従って定義した角度記号に置換し、置換された前記角度記号を前記着目する第 $(n+3)$ 階位の原子に記号付与し、同様にして、他の着目する原子に対し二面角の大きさに応じて角度記号を記号付与する記号化工程と、

前記分子ツリー体を一行の文字列で表記するための所定の線形表記規則を設定

し、前記所定の線形表記規則に従って複数の前記角度記号からなる集合を前記分子ツリー体に対応させて線形表記して、前記スタート原子に対して分子の立体配座を表す立体配座コードを作成し、同様にして、他のスタート原子に対し立体配座コードを作成する立体配座コード作成工程と、  
を備えることを特徴とするプログラムを記録したコンピュータ読み取り可能な記録媒体。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】

本発明は、分子の立体化学コード化方法に係り、特に、分子を構成する複数の原子の個々の原子の回りの立体化学を取り入れて分子をコード化する分子の立体化学コード化方法に関する。

【0002】

【従来の技術】

コンピュータに書き込みまたは読み込み可能なように分子構造の立体化学情報を記述する方法として、カルテシアン座標系や内部座標系などの3次元座標系で原子位置を記述する方法や、立体化学を含めた一義的な分子の命名を目的とした原子のトポロジカルな関係を数学的に記述する方法がある。

【0003】

前者の3次元座標系で記述する方法では分子を一義的に表現出来ないために、複数の分子の類似性や相同性の比較が困難あるいは煩雑になる。後者のような原子のトポロジカルな関係を数学的に記述する方法では、不斉炭素の絶対配置(R, S)の表記などは可能であるが、任意の原子間の相対的な立体環境は記述されないため、立体配座(コンホメーション、conformation)の情報などを表現できないのが現状である。

【0004】

【発明が解決しようとする課題】

例えば、既存のデータベースからNMRの化学シフトを予測しようとする場合に、それに適した立体化学の情報を規範的(canonical)にコード化されたもの



が無い。このため、現状では平面構造の情報のみが用いられている。立体化学が考慮されたデータベースに基づいた化学シフトの予測は、従来のどの化学シフト予測コンピュータシステムにおいても実現されていない。

## 【0005】

また、複数の分子の間で立体配座（コンホメーション、conformation）や立体配置（コンフィギュレーション、configuration）等の立体構造環境の異同に関する情報をコンピュータに読み取り可能なデータとして容易に利用可能な表記手法は存在していなかった。

## 【0006】

そこで本発明の目的は、上記従来技術の有する問題を解消し、例えばNMRの化学シフト予測等に適用可能であり、立体配座（コンホメーション、conformation）や立体配置（コンフィギュレーション、configuration）等の分子の立体構造環境の情報をコンピュータに読みとり可能に規範的にコード化する分子のコード化方法を提供することである。

## 【0007】

## 【課題を解決するための手段】

上記目的を達成するために、本願の第1の発明は、分子を構成する複数の原子の個々の原子の回りの立体化学を取り入れて分子をコード化する分子の立体化学コード化方法であって、着目するスタート原子を最低階位として第0階位に分類し、前記スタート原子と高階位側で結合する原子を第1階位に分類し、前記第1階位の原子と高階位側で結合する原子を第2階位に分類し、同様に、所望により設定する最終の階位に至るまで順々に原子を階位に分類する階位分類工程と、同じ階位に属する複数の原子を互いに順位付けするための所定の優先順位規則を設定し、階位毎に同じ階位に属する原子を前記優先順位規則に従って順位付けして順位配列し、前記複数の原子の間の結合関係を表すように低階位から高階位に向かって分子ツリー体を前記スタート原子毎に形成する分子ツリー体形成工程と、前記分子ツリー体において、 $n$ を0以上の整数とするとき各々の整数 $n$ について、第 $(n+3)$ 階位に分類された一つの原子に着目し、着目する第 $(n+3)$ 階位の原子と、前記第 $(n+3)$ 階位の原子に結合される第 $(n+2)$ 階位の

原子と、前記第  $(n+2)$  階位の原子に結合される第  $(n+1)$  階位の原子と、前記第  $(n+1)$  階位の原子に結合される第  $n$  階位の原子の 4 個の原子からなるグループに対し、前記第  $(n+3)$  階位の原子と、前記第  $(n+2)$  階位の原子と、及び前記第  $(n+1)$  階位の原子で形成される平面と、前記第  $(n+2)$  階位の原子、前記第  $(n+1)$  階位の原子、及び前記第  $n$  階位の原子で形成される平面との間の二面角を求め、求めた前記二面角をその大きさに応じて所定の角度分割規則に従って定義した角度記号に置換し、置換された前記角度記号を前記着目する第  $(n+3)$  階位の原子に記号付与し、同様にして、他の着目する原子に対し二面角の大きさに応じて角度記号を記号付与する記号化工程と、前記分子ツリー体を一系列の文字列で表記するための所定の線形表記規則を設定し、前記所定の線形表記規則に従って複数の前記角度記号からなる集合を前記分子ツリー体に対応させて線形表記して、前記スタート原子に対して分子の立体配座を表す立体配座コードを作成し、同様にして、他のスタート原子に対し立体配座コードを作成する立体配座コード作成工程と、を備えることを特徴とする。

## 【0008】

第 1 の発明において、分子ツリー体において着目した第  $(n+3)$  階位の原子から第  $n$  階位の原子まで順々に低階位側に向かって 4 個の原子を指定しグループを設定するようにしたので、4 個の原子からなるグループは一義的に定まり、このグループにおける二面角は一義的に求められる。角度記号で表された分子ツリー体を所定の線形表記規則に従って線形表記し、立体配座コードが形成されるので、立体化学の情報をコンピュータ読み取り可能にコード化することができる。比較する分子間で立体配座コードを比較することにより、立体配座（コンホメーション、conformation）の異同を判断することができる。

## 【0009】

また、本願の第 2 の発明は、第 1 の発明において、分子の立体配置を表す立体配置コードを前記スタート原子毎に作成する立体配置コード作成工程をさらに備え、前記立体配置コード作成工程は、着目する第  $n$  階位の原子を前記角度分割規則の基準位置に位置させ、第  $(n+3)$  階位に属する原子の中で前記優先順位規則に従い所定優先度を有する原子が前記基準位置に対し所定角度位置に位置する

ように、前記第 $(n+3)$ 階位に属する原子を一体的に第 $(n+1)$ 階位の原子と第 $(n+2)$ 階位の原子とを結ぶ結合軸の回りに回転させ、前記基準位置に対する回転後の角度位置に応じて前記第 $(n+3)$ 階位に属する原子の各々に前記角度分割規則に従う角度記号を記号付与し、前記所定の線形表記規則に従って複数の前記角度記号からなる集合を前記分子ツリー体に対応させて線形表記して、前記立体配置コードを前記スタート原子毎に作成することを特徴とする

第2の発明において、立体配置コードの他にさらに線形表記された分子の立体配置を表す立体配置コードが得られるので、立体配座と立体配置とを含む立体化学の情報をコンピュータ読み取り可能にコード化することができる。

#### 【0010】

また、本願の第3の発明は、第2の発明において、分子の平面構造を表す平面構造コードを前記スタート原子毎に作成する平面構造コード作成工程をさらに備え、前記平面構造コード作成工程は、前記分子ツリー体を前記複数の原子の間の結合関係を平面構造的に表記する平面構造記号の集合で表し、前記所定の線形表記規則に従って複数の前記平面構造記号からなる集合を前記分子ツリー体に対応させて線形表記して、前記スタート原子に対して分子の平面構造を表す平面構造コードを作成し、同様にして、他のスタート原子に対し平面構造コードを作成することを特徴とする。

#### 【0011】

第3の発明において、立体配座コード及び立体配置コードの他にさらに線形表記された分子の平面構造を表す平面構造コードが得られるので、平面構造と立体配座と立体配置とを比較する分子の間で総合的に比較検討することを容易に行うことができる。

#### 【0012】

また、第3に発明において、前記スタート原子に対し、前記立体配座コードと前記立体配置コードと前記平面構造コードとが並記して表示されることにより、分子の平面構造を表す平面構造コードを参照しつつ、立体配座コード及び立体配置コードを容易に比較することができる。

#### 【0013】

また、第 2 に発明において、前記第  $(n+3)$  階位に属する原子を第  $(n+1)$  階位の原子と第  $(n+2)$  階位の原子とを結ぶ結合軸の回りに回転させることが不能である場合には、前記記号化工程で記号付与した角度記号をそのまま採用し、前記所定の線形表記規則に従って複数の前記角度記号からなる集合を前記分子ツリー体に対応させて線形表記して、前記立体配置コードを前記スタート原子毎に作成することを特徴とする。これによって、第  $(n+3)$  階位に属する原子を第  $(n+1)$  階位の原子と第  $(n+2)$  階位の原子とを結ぶ結合軸の回りに回転させることが不能である場合にも、立体配置コードを形成することができる。

## 【0014】

また、第 3 に発明において、前記平面構造コードは、キャノスト線形表記であることによって、既存の手法を利用することができる。

## 【0015】

また、第 1 に発明において、前記優先順位規則は、キャノストコード優先順位規則であることによって、既存の手法を利用することができる。

## 【0016】

また、第 1 に発明において、前記所定の線形表記規則は、キャノストコード線形表記規則であることによって、既存の手法を利用することができる。

## 【0017】

また、第 1 に発明において、前記分子ツリー体形成工程において、立体化学を識別する上で着目性の低い原子群を所定記号に置換しマスキングすることを特徴とする。これによって、本来的な構造上の違いに基づかない違いを無視し構造上の違いに基づいた違いの有無を調べることが可能になる。

## 【0018】

また、第 1 に発明において、前記所定の角度分割規則は、 $360$  度の角度を時計時刻目盛状に所定数に分割し、分割された角度範囲は存在性の高低を反映して不等分であることを特徴とする。これによって、立体配座コードの適用性と信頼性を高めることができる。

## 【0019】

また、第 1 に発明において、前記立体配座コード作成工程において、階位数が

3 階位以上離れた少なくとも 2 個の前記スタート原子に対して前記立体配座コードが作成されることを特徴とする。これによって、スタート原子を例えば 2 個とした場合においても、レベル 0、レベル 1 及びレベル 2 の原子も含めて分子における全ての二面角を得ることが可能になる。

【0 0 2 0】

また、本願の第 4 の発明は、第 1 の発明に係る発明をプログラムしたものを記録したコンピュータ読み取り可能な記録媒体である。これによって、第 1 の発明に係る発明をコンピュータによって容易に実行することが可能になる。

【0 0 2 1】

【発明の実施の形態】

以下に図面を参照して、本発明に係る分子のコード化方法の実施の形態について説明する。

【0 0 2 2】

まず、本発明に係る分子の立体化学コード化方法を説明する上で、採用したモデル分子について説明する。

【0 0 2 3】

モデル分子として、環状分子と鎖状分子の形態で表現でき、様々な立体配座（コンホメーション）をとり、また立体異性体も多く存在するのでモデルの一つとして糖を用いた。

【0 0 2 4】

具体的には、モデル分子として、D-グルコース（略：G l c），4 位の異性体である D-ガラクトース（略：G a l）、2 位の異性体である D-マンノース（略：M a n）等を用いた。1 位の立体化学については、a-G l c などのように a-のついているものは $\alpha$ -G l c の配位であることを示し、b-のついているものは $\beta$ -G l c の配位であることを示す。図 2 0 等においても、同様に、a-G l c などのように a-のついているものは $\alpha$ -G l c の配位であることを示し、b-のついているものは $\beta$ -G l c の配位であることを示す。

【0 0 2 5】

1 C，4 C は各々 1 位または 4 位の炭素が椅子型（c h a i r f o r m）の

頂部に位置する立体配座を示し、14Bは1位と4位の炭素が舟型 (boat form) の両端に位置する立体配座を示し、14TWは14Bの立体配座から誘導したねじれ舟型 (twist-boat form) の立体配座を示す。

## 【0026】

これらの糖は、1位の還元末端がアルデヒド ( $-CHO$ ) になった鎖状の形態もとる。鎖状の形態をとるもののうち、元の環状構造の立体配座を保持しているものには4C-chainなどのように環状の立体配座を併記するように表示されている。また、4C-chain-linearなどのように、-linearが最後に付されたものは炭素鎖が直線状になった安定な立体配座の一つであることを示す。a-Glc-1C-chain-H-bondは3位の水酸基と1位のカルボニル間に水素結合ができる立体配座であることを示す。

## 【0027】

2重結合のモデルとしては1-bromo-4-chlorobutadieneの4種の幾何異性体を用いた。立体配座は中央の単結合と2重結合が同一平面にある平面的なものである。

## 【0028】

次に図面を参照して、分子の立体化学をコード化する方法について具体的に説明する。

## 【0029】

図1はa-Glc-4Cをモデル分子として分子ツリー体とキャノスト線形表記 (平面構造コード) を形成する手順を示す。図1(a)は、a-Glc-4Cの立体配座を示す図であり、同じものが拡大して図2に示されている。a-Glc-4Cについては、後述するa-Glc-4C-chainと比較して、図12(a)にa-Glc-4Cの平面構造 (planar structure) を示し、図13(a)に立体配置 (configuration) を示す。

## 【0030】

ノード番号1-6が炭素のC-1~C-6に相当し、ノード番号7-12がO-1~O-6に相当する。

## 【0031】

ここでは、例として、ノード6の炭素原子に着目し、スタート原子としてノード6の炭素原子を設定する。以後の手続きは、着目するスタート原子毎に同様に行われる。

## 【0032】

まず、本発明における階位分類工程について説明する。

## 【0033】

図1 (b) に示すように、スタート原子をレベル0として分類し、スタート原子と高階位側で結合する4個の原子O, H, H, Cをレベル1として分類し、スタート原子との結合を示すとともにレベル1の4個の原子O, H, H, Cを縦列に並べる。同様にして、レベル1の原子に高階位側に結合する原子をレベル2として分類し、同様にして、所望により設定する最終の階位に至るまで順々に原子を階位に分類する。このようにして、階位分類工程によって図1 (b) に示すような第1の分子ツリー体が形成される。

## 【0034】

ここで、所望により設定する最終の階位としては、比較の対象とする分子間の類似性をどの程度まで厳密に求める必要があるのかを考慮してその程度に応じて設定すればよく、最終の階位をスタート原子からより深い階位またはより高い階位に設定するほど類似性の程度を厳密に判断することが可能になる。

## 【0035】

次に、本発明における分子ツリー体形成工程について説明する。

## 【0036】

図1 (b) に示す第1の分子ツリー体における原子記号を、図4に示すようなキャノストコードリスト (CANOST CODE LIST) に従って、キャノストコードに変換する。この結果、図1 (c) に示すように、第2の分子ツリー体が形成される。図4に示すキャノストコードリストにおいては、「no.」の欄に記載された数字順によって優先順位が定められており、「structure」の欄に記載された部分構造は「code」の欄に記載されたキャノストコードで表される。

## 【0037】

次に、図 1 (c) に示す第 2 の分子ツリー体に対し、同じ階位に属する複数の原子を互いに順位付けするための所定の優先順位規則を設定する。ここでは、所定の優先順位規則として、図 4 に示すようなキャノストコードリストに記載された優先順位規則を採用する。キャノストコード優先順位規則の適用に当たっては、より低階位から優先的に順々に適用し、各階位毎にその階位に含まれるキャノストコードを配列する。

## 【 0 0 3 8 】

キャノストコード優先順位規則に従い、第 2 の分子ツリー体において並べ替えを行い、図 1 (d) に示す第 3 の分子ツリー体を形成する。第 3 の分子ツリー体において、同じ階位に属する複数の原子の間では上方から下方に向かって優先順位が低くなるように配列されている。図 3 に拡大して示す第 3 の分子ツリー体为本願発明における分子ツリー体に相当する。

## 【 0 0 3 9 】

次に、分子ツリー体を一系列の文字列で表記するための所定の線形表記規則について説明する。ここでは、図 1 (e) を参照して、所定の線形表記規則の一例として採用するキャノストコード線形表記規則について説明する。

## 【 0 0 4 0 】

図 1 (e) において、「\*」は隣接するレベルの間の境界を示す。「;」は同じ階位に属する原子の間の境界を示す。「,」は結合する一つ低階位の原子の境界を示す。なお、図 1 (e) において、ノード 2 の C 1 に付されたアンダーラインは、分子ツリー体を作成する際に環状構造を切断した原子位置であることを示す。

## 【 0 0 4 1 】

なお、図 1 (e) に示す線形表記されたものは、分子の平面構造を表す平面構造コードの一例であるキャノスト線形表記を示すものであり、後述する図 2 0 等における「CANOST」に相当するものである。

## 【 0 0 4 2 】

前述のことから明らかなように、本発明における平面構造コードは、次のようにして形成される。すなわち、複数の原子の間の結合関係を平面構造的に表記す



る平面構造記号、例えばキャノストコードを用いて表現された第 3 の分子ツリー体を、一列の文字列で表記するための線形表記規則（キャノストコード線形表記規則）に従って線形表記してスタート原子毎に分子の平面構造を表す平面構造コードが図 1（e）に示すように作成される。

#### 【0043】

図 5 に、a-Glc-4C-chain をモデル分子として作成した分子ツリーとキャノスト線形表記を示す。図 5 において、a-Glc-4C-chain の立体配座（a）から（b）に示す第 1 の分子ツリー体が形成され、第 1 の分子ツリー体からキャノストコードに変換して（c）に示す第 2 の分子ツリー体が形成され、キャノストコード優先順位規則を用いて第 2 の分子ツリー体から（d）に示す第 3 の分子ツリー体が形成される。さらに、キャノストコード線形表記規則を用いて第 3 の分子ツリー体から（e）に示すキャノスト線形表記が得られる。a-Glc-4C-chain については、a-Glc-4C と比較して、図 12（b）に平面構造（planar structure）を示し、図 13（b）に立体配置（configuration）を示す。

#### 【0044】

次に、本発明における記号化工程について説明する。

#### 【0045】

図 3 は図 1（d）に示す分子ツリー体（第 3 の分子ツリー体）を拡大して示す図である。図 3 において、例えば、レベル 4 の「Q1」11 に着目する。次に、レベル 3 で「Q1」11 に結合されるレベル 3 の「C1」12 を抽出する。「Q1」11 に結合されるレベル 3 の原子は一義的に「C1」12 に定まる。次に、レベル 2 で「C1」12 に結合される「C1」13 を抽出する。同様に、「C1」12 に結合されるレベル 2 の原子は一義的に「C1」13 に定まる。次に、レベル 1 で「C1」13 に結合される「C1」14 を抽出する。同様に、「C1」13 に結合されるレベル 1 の原子は一義的に「C1」14 に定まる。このようにして、4 個の原子、レベル 4 の「Q1」11 と、レベル 3 の「C1」12 と、レベル 2 の「C1」13 と、レベル 1 の「C1」14 とから構成される 1 グループが設定される。

## 【0046】

ここで注目すべきことは、分子ツリー体において高階位側から低階位側へ下るようにして結合相手となる原子を抽出しているために、着目する原子（上記の例では、レベル4の「Q1」11）を定めると、4個の原子からなるグループが一義的に定まることである。このために、本発明によれば、着目した原子の立体化学を、以下に述べる二面角によって一義的に表現できるのである。

## 【0047】

次に、レベル4の「Q1」11と、レベル3の「C1」12と、レベル2の「C1」13と、レベル1の「C1」14との4個のグループに対し、二面角を求める。ここで、二面角とは、レベル4の「Q1」11と、レベル3の「C1」12と、レベル2の「C1」13とで形成される平面と、レベル3の「C1」12と、レベル2の「C1」13と、レベル1の「C1」14とで形成される平面とのなす角度をいう。二面角の値は、a-G1c-4Cの分子3次元構造に関する情報から得られる。

## 【0048】

着目するレベル4の「Q1」11に対して求めた二面角をその大きさに応じて所定の角度分割規則に従って定義した角度記号に置換し、置換された角度記号を着目するレベル4の「Q1」11に記号付与する。

## 【0049】

ここで、所定の角度分割規則の一例を図6を参照して説明する。ここで採用した角度分割規則は、360度の角度を時計時刻目盛状に12個の角度範囲に分割する。分割された角度範囲の中心には、時計の目盛数字に対応する記号が付けられている。図6に示すように、0時の角度位置にはze (zero)、1時の角度範囲にはon (one)、2時の角度範囲にはtw (two)、3時の角度範囲にはth (three)、4時の角度範囲にはfo (four)、5時の角度範囲にはfi (five)、6時の角度位置にはsi (six)、7時の角度位置にはse (seven)、8時の角度位置にはei (eight)、9時の角度範囲にはni (nine)、10時の角度範囲にはte (ten)、11時の角度範囲にはel (eleven)の12個の角度記号が設けられている。これ

らの12個の角度記号によって、対応する角度範囲が表される。

#### 【0050】

図6に示す角度分割は、主として $sp^3$ タイプの原子がとる立体構造の存在比に基づくものである。すなわち、図7(a)に示すstaggered conformation (鎖分子や6員環の安定配座など)のものには60, 180, 300度を角度中心位置にして広い40度の角度範囲を与え、それぞれtw, si, teの角度記号を記号付与している。また、図7(b)に示す次に存在比が多いeclipsed conformation (少数員環やビシクロ環など)のものには0, 120, 240度を角度中心位置にして広い40度の角度範囲を与え、それぞれze, fo, eiの角度記号を記号付与している。これ以外の90, 210, 330, 30, 150, 270度を角度中心位置にする角度範囲には、それぞれth, se, el, on, fi, niの6つの角度記号を記号付与している。

#### 【0051】

なお、これ以外に、アルキン(alkyne)やアレン(allene)などに含まれる二面角を定義できない原子に対しては、それらのための特殊コードを設定して記号付与することにより、上述のような角度記号を付与した場合と同様に、分子ツリー体を線形表記することができる。 $sp^2$ タイプと $sp$ タイプの原子に対してはそのためのコードを設定し表現することが可能である。

#### 【0052】

図6に示す角度分割規則に従えば、a-Glc-4Cの分子3次元構造に関する情報に基づき、前述の着目するレベル4の「Q1」11には角度記号として「si」が記号付与される。

#### 【0053】

同様にして、前述したように、4つのレベルのまたがる4個の原子からなるグループに対して二面角を求め、角度記号を記号付与する。

#### 【0054】

なお、レベル2、レベル1またはレベル0に属する原子は、より低階位方向に下っても4個の原子からなるグループを形成することができない。そこで、レベル0、レベル1及びレベル2の原子には、図20等の「Stereo」に示され

ているように、それぞれ、一律に「A」、「B」、「C」の記号が記号付与される。

#### 【0055】

このようにして、「A」、「B」、「C」や「ze」・・・「el」からなる角度記号を用い、図3に示す分子ツリー体は角度記号によって置換される。

#### 【0056】

次に、本発明における立体配座コード作成工程について説明する。

#### 【0057】

角度記号で記号化された分子ツリー体をキャノストコード線形表記規則に従って分子ツリー体に対応させて線形表記する。そして、a-Glc-4Cのノード6の原子をスタート原子に対して立体配座コードが作成される。作成されたa-Glc-4Cのノード6の原子をスタート原子とする立体配座コードは、図20における「Stereo」の左欄の番号「6」の位置に示されている。

#### 【0058】

同様に、a-Glc-4Cにおける他の原子をスタート原子として、図20における「Stereo」の左欄の番号「1」等の位置に示されるような立体配座コードが作成される。

#### 【0059】

以上のように、階位分類工程と、分子ツリー体形成工程と、記号化工程と、立体配座コード作成工程とによって、立体配座コードが求められる。図20乃至図29に、種々の分子に対して求めた立体配座コード（「Stereo」として表記されている）が示されている。なお、図20乃至図29等においては、平面面構造コードであるキャノスト線形表記が「CANOST」と、後述する立体配置コードが「Configuration」として並記されている。

#### 【0060】

なお、立体配座コード作成工程において、全てのノードの原子をスタート原子としなくとも、階位数が3階位以上離れた2個のスタート原子に対して立体配座コードを作成すれば、分子の全体の立体化学を表現することが可能になる。これによって、全てのノードの原子をスタート原子として採用しなくとも、立体化学

に関し着目した原子またはそれらの近傍の原子のみをスタート原子として採用してそれに対応する立体配座コードを求めるだけで、必要な立体化学を知ることが十分に可能になる。

#### 【0061】

ここで、2個のスタート原子の階位数が3階位以上離れているとしたのは、レベル0、レベル1及びレベル2の原子も含めて全ての二面角を得ることができるようにするためである。

#### 【0062】

また、分子ツリー体形成工程において、立体化学を識別する上で着目性の低い原子群を所定記号に置換しマスキングすることも可能である。これによって、立体化学を識別する上で着目性の高い原子群の立体化学を直接的に比較することが可能になる。

#### 【0063】

次に、本発明の他の実施の形態について説明する。

#### 【0064】

本発明においては、分子の立体配置 (configuration) を表す立体配置コードを作成することができる。以下に立体配置コードを作成する立体配置コード作成工程について説明する。

#### 【0065】

図8は、立体配座コード作成工程をニューマン投影図で示す図である。一つの原子に結合された第 $(n+3)$ 階位に属するC1, H, Q1のコードで示された3個の原子C1, H, Q1と、これらに対し3階位数だけ低位にある第 $n$ 階位に属する原子20が示されている。原子20を基準位置、例えば0時の「ze」に位置させる。次に、第 $(n+3)$ 階位に属する3個の原子C1, H, Q1の各々を、図示されていない第 $(n+1)$ 階位の原子と第 $(n+2)$ 階位の原子とを結ぶ結合軸の回りに回転させ、原子20に重なるようにするのに要する角度が二面角の大きさである。図8に示す立体構造式から明らかなように、左側の投影図(a)と右側の投影図(b)とにおいて、第 $(n+3)$ 階位に属する3個の原子がC1, H, Q1であるという点では両分子において共通しているが、原子20に

対する立体化学は異なる。このことは、図8において、立体配座コード（ここではSTERTEOコードと表記されている）を参照すると、立体配座コードが分子（a）と分子（b）との間で互いに異なる、ということによって示されている。

## 【0066】

しかしながら、図8に示されている情報のみでは、投影図（a）と投影図（b）との間で立体配座の異同についてはわからない。そこで、以下に分子の立体配座の異同を識別可能な立体配置コード作成工程を示す。

## 【0067】

図9において、第（ $n+3$ ）階位に属する3個の原子C1, H, Q1の間で、前述のキャノストコード優先順位規則に従い優先度の最高の原子（C1）に着目する。そして、最優先度のC1が基準位置「ze」に対し180度の角度位置である「si」の角度位置にくるように、第（ $n+3$ ）階位に属する3個の原子C1, H, Q1を一体的に第（ $n+1$ ）階位の原子と第（ $n+2$ ）階位の原子とを結ぶ結合軸の回りに回転させる。この回転の後に、基準位置「ze」に対する角度位置に応じて第（ $n+3$ ）階位に属する原子C1, H, Q1の各々に角度記号を記号付与する。図9に示されているように、立体配置コード（ここではconfiguration識別コードと表記されている）が投影図（a）と投影図（b）との間で互いに同じであり、従って、互いに立体配座が互いに同じであることがわかる。

## 【0068】

図10及び図11は、 $sp^2$ タイプの原子の単結合に関する立体配座と立体配置を説明する図である。

## 【0069】

図10において、第（ $n+3$ ）階位に属するDS, C1のコードで示した原子と、これらに対し3階位数だけ低位にある第 $n$ 階位に属する原子20が示されている。原子20を基準位置「ze」に位置させ、次に、第（ $n+3$ ）階位に属する2個の原子DS, C1の各々を、図示されていない第（ $n+1$ ）階位の原子と第（ $n+2$ ）階位の原子とを結ぶ結合軸の回りに回転させ、原子20に重なるよ

うにするのに要する角度として二面角が求められる。図10において、図8の場合と同様に求められた立体配座コード（ここではSTERTEOコードと表記されている）が示されている。第 $(n+3)$ 階位に属する原子DS、C1は第 $(n+1)$ 階位の原子及び第 $(n+2)$ 階位の原子と同一平面上にあるので、DSのコードが「on」であるのに対しC1のコードは「on」と180度の角度位置にある「se」になる。

【0070】

図11は、 $sp^2$ タイプの原子の単結合に関しては、図9に示したものと同様に、立体配置コード（ここではconfiguration識別コードと表記されている）が求められる。

【0071】

$sp^2$ タイプの原子の二重結合の部分に関しては、第 $(n+3)$ 階位に属する原子を、第 $(n+1)$ 階位の原子と第 $(n+2)$ 階位の原子とを結ぶ結合軸の回りに回転させることができない。そこで、立体配座コードにおける角度記号をそのまま採用し、立体配置コードを作成すればよい。

【0072】

また、 $sp$ タイプの原子については、三重結合とその周りあるいはalleneなどの特殊な構造に対してそれらを表現する特殊コードを用いることによって、立体配座と立体配置を表現することが可能になる。

【0073】

以上のように、立体配置コード作成工程によって、分子の立体配置(configuration)を表す立体配置コードを作成することができる。図20乃至図29に、種々の分子に対し求めた立体配置コード（ここでは、Configurationと表記されている）が示されている。

【0074】

次に、本発明を分子に具体的に適用した例を示す。

【0075】

図20に、a-Glc-4Cに対して、平面構造コードであるキャノスト線形表記（ここでは、CANOSTと表記されている）と、立体配座コード（ここで

は、S t e r e oとして表記されている)と、立体配置コード(ここでは、C o n f i g u r a t i o nと表記されている)が並記されている。

## 【0076】

また、図21に、立体化学を識別する上で着目性の低い原子群をマスキングして求めた立体配座コード(S t e r e o)が示されている。上段にあるものは、マスキングしないものであり、中段にあるものはメチレン基「CH<sub>2</sub>」に含まれる各水素原子を「H」というコードに置換してマスキングしたものであり、下段にあるものはメチレン基「CH<sub>2</sub>」に含まれる各水素原子を「H」というコードに置換するとともに水酸基「OH」に含まれる水素原子を「OH」というコードに置換してマスキングしたものである。

## 【0077】

図22に、a-G l c-4 Cの比較対象であるb-G l c-4 Cの立体配座コード(ここでは、S t e r e oとして表記されている)を示す。上段にあるものは、マスキングしないものであり、中段にあるものはメチレン基「CH<sub>2</sub>」に含まれる各水素原子をマスキングしたものであり、下段にあるものはメチレン基「CH<sub>2</sub>」と水酸基「OH」に含まれる原子を上述のようにマスキングしたものである。

## 【0078】

図15に、a-G l c-4 Cとb-G l c-4 Cの立体構造式を示す。前述したように、1位の立体化学については、a-G l cなどのようにa-のついているものは $\alpha$ -G l cの配位であることを示し、b-のついているものは $\beta$ -G l cの配位であることを示す。なお、図15乃至図18において、斜線表示は酸素を表し、白抜き表示を炭素を表し、砂地表示は水素を表す。

## 【0079】

図20、図21及び図22を参照して、a-G l c-4 Cとb-G l c-4 Cの立体配座コード(S t e r e o)を比較する。

## 【0080】

a-G l c-4 Cとb-G l c-4 Cの2つの分子は炭素骨格のコンホメーションは4 Cで共通であるが1位の立体化学が異なる。また、2位の水酸基の水素



の向きも大きく異なっている。

#### 【0081】

図 22 において、二重下線で示す部分が 1 位の立体化学の違いによって異なるコードが振られた部分である。二重下線で示す部分に着目することによって、 $a-Glc-4C$  と  $b-Glc-4C$  の 2 つの分子の間の 1 位の立体化学が異なることを知ることができる。

#### 【0082】

また、一重下線で示す部分は水酸基の配向に関する違いを示す部分である。水酸基の配向に関する違いを知りたい場合には、この一重下線で示す部分を着目すればよい。

#### 【0083】

また、波下線の部分は 6 位のメチレン ( $CH_2$ ) の二つの水素の *serial no* が構造入力の際に異なったためにキャノストコード優先順位規則の優先順位が逆転したために生じたものである。*Serial no* の違いによるものは本来の構造上の違いではないので、このような場合には、上述したように、他の角度記号に置換してマスキングされる。これによって、本来の構造上の違いに基づかない違いを無視し構造上に基づいた違いの有無を有効に調べることが可能になる。

#### 【0084】

なお、水酸基の配向は識別する必要のある場合もあるが、一般にはこれを見捨てた基本骨格の立体配座のみを比較することが多いので、その場合には、水酸基の水素の対応するコードについては「OH」でマスキングされる。

#### 【0085】

スタート原子としては、水素を省略しノード番号 1-6 が炭素の C-1~C-6 に相当し、ノード番号 7-12 が O-1~O-6 に相当する。 $a-Glc-4C$  と  $b-Glc-4C$  は 1 位のエピマーであるが、ノード番号 1, 2 及び 11 からスタートするもの以外は全て異なったコードが部分的に存在している。1 位の不斉中心に近いところから始まる立体配座コード (*Stereo*) には 1 位の不斉中心のまわりの 2 面角情報がないので不斉中心から離れた点にあるスタート原

子の立体配座コード (S t e r e o) によって分子の識別が可能である。なお、前述したように、一般的には3結合以上離れた位置の2個のスタート原子の立体配座コードによって分子全体の立体配座を表現でき、また立体異性を識別することができる。

## 【0086】

図22によれば、a-Glc-4Cに対するb-Glc-4Cの立体配座コード (S t e r e o) の相違する部分が、マスキングしない場合 (上段)、マスキングした場合 (中段、下段) とについて、一目瞭然に知ることができる。

## 【0087】

次に、図23乃至図25において、図15及び図16に立体構造式を示す種々の分子に対して、スタート原子としてノード6とノード7の2個だけを選び、求めた結果を比較して示す。図23ではマスキングしない立体配座コード (S t e r e o) が比較され、図24ではマスキングした立体配座コード (S t e r e o) が比較され、図25では立体配置コード (C o n f i g u r a t i o n) が比較されている。いずれも、a-Glc-4Cに対して比較したものであり、相違する部分が、前述したものと同様に、一重下線と二重下線で示されている。

## 【0088】

また、図26乃至図28において、図18に立体構造式を示す種々の分子に対して、スタート原子としてノード6とノード7の2個だけを選び求めた結果を比較して示す。図12 (b) に、分子の平面構造式を示す。図26ではマスキングしない立体配座コード (S t e r e o) が比較され、図27ではマスキングした立体配座コード (S t e r e o) が比較され、図28では立体配置コード (C o n f i g u r a t i o n) が比較されている。いずれも、a-Glc-4C-chainに対して比較したものであり、相違する部分が一重下線と二重下線で示されている。

## 【0089】

また、図29において、図19に化学式を示す種々の分子に対して、スタート原子としてBr原子とCl原子の2個だけを選び、立体配座コード (S t e r e o) と立体配置コード (C o n f i g u r a t i o n) が比較されている。

(1E,3E)-1-Bromo-4-chlorobutadieneに対して比較したものであり、相違する部分が一重下線と二重下線で示されている。

## 【0090】

次に、図30を参照して、立体配座コード (S t e r e o) と立体配置コード (C o n f i g u r a t i o n) の使用例を示す。

## 【0091】

前述したように、図15、図16及び図17に立体構造式を示す種々の分子に対して図23乃至図25において立体配座コード (S t e r e o) と立体配置コード (C o n f i g u r a t i o n) が得られた。

## 【0092】

図30のST1において、図23乃至図25に示すデータを用いて、a-Glc-4Cと図15及び図16に示す分子の間の立体化学を比較する。

## 【0093】

ST2で、比較対象の分子とa-Glc-4Cとの間で立体配座コード (S t e r e o) が同じか異なるかが比較される。

## 【0094】

ST2で立体配座コード (S t e r e o) が同じと判定された場合には、ST3で、両者は立体配置も立体配座も同じであると判断される。

## 【0095】

ST2で立体配座コード (S t e r e o) が異なると判定された場合には、ST4で、立体配置コード (C o n f i g u r a t i o n) が同じか異なるかが比較される。

## 【0096】

ST4で、立体配置コード (C o n f i g u r a t i o n) が同じと判定された場合には、ST5で、両者は立体配座が異なり、立体配置は同じであり、互いに立体配座異性体であると判断される。a-Glc-4Cに対して、a-Glc-1C、a-Glc-14B、a-Glc-14TWが該当する。

## 【0097】

ST4で、立体配置コード (C o n f i g u r a t i o n) が異なると判定さ

れた場合には、ST6で、立体配置コード (Configuration) が異なる場所以外で立体配座コード (Stereo) が同じか否かが判定される。

## 【0098】

ST6で、立体配置コード (Configuration) が異なる場所以外では立体配座コード (Stereo) が同じと判定された場合には、ST7で、両者は立体配置が異なり、立体配座が同じであると判断される。より正確には、立体配置コード (Configuration) が一致する箇所の立体配座が同じであると判断される。a-Glc-4Cに対して、b-Glc-4C、a-Gal-4C、a-Man-4Cが該当する。

## 【0099】

ST6で、立体配置コード (Configuration) が異なる場所以外でも立体配座コード (Stereo) が異なると判定された場合には、ST8で、両者は立体配置も立体配座も異なると判断される。a-Glc-4Cに対して、a-Gal-1C、a-Man-1Cが該当する。

## 【0100】

以上のように、立体配座コード (Stereo) と立体配置コード (Configuration) とを用いて、分子の間の立体化学の異同を極めて容易に知ることが可能になる。

## 【0101】

なお、比較する分子が鏡像体 (enantiomer) の関係にあるか否かについても、次のようにして容易に判定することができる。すなわち、鏡像体 (enantiomer) は立体配座コード (Stereo) でも立体配置コード (Configuration) でも、お互いに時計を鏡に映した関係のコードが割り振られている。例えば「on」と「el」や「tw」と「te」という関係であり、「ze」と「si」のコードは変化しない関係にある。したがって、例えば、「on」を「el」に変換し「tw」を「te」に変換し、「ze」または「si」はそのままにして、一方の立体配座コード (Stereo) 等におけるコードを鏡像関係にあるコードに変換し、変換して記述された立体配座コード (Stereo) 等が比較する相手の立体配座コード (Stereo) 等と一致

しているか否かを調べることにより、比較する分子が鏡像体 (e n a n t i o m e r) の関係にあるか否かを識別することが可能になる。

【0102】

また、部分構造認識については、次のようにいえる。すなわち、以上に説明した例は分子全体の認識に関するものであったが、 $^{13}\text{C}$ -NMRのシフト予測などに適用するには部分構造の部分的な立体配座 (コンホメーション) の識別と相対配置に関する比較が必須である。これは、本願発明において、着目すべき炭素から3結合先のH以外のノードから出発した立体配座コード (S t e r e o) と立体配置コード (C o n f i g u r a t i o n) の組み合わせて比較を行うことで可能となる。

【0103】

また、 $^{13}\text{C}$ -NMRへの応用については、知的データベースを利用して $^{13}\text{C}$ -NMRの化学シフトを予測する場合には、例えば、立体配座コード (S t e r e o) と立体配置コード (C o n f i g u r a t i o n) を注目すべき炭素から3結合先のH以外のノードから出発したコードに関して、そのスタート原子のノードのレベルnからレベルn+3以上の深さのレベルまでの比較を行えば良い。より深いレベルで一致していることは、より高い類似性をもっていることに相当する。レベルのもっとも深いところまで比較することによって分子全体の比較を行うことができる。平面構造コード (C A N O S T) が一致しておりかつ立体配置コード (C o n f i g u r a t i o n) 及び立体配座コード (S t e r e o) がより深いレベルで一致していることが、比較する分子の間で確認できるときには、より高い精度で $^{13}\text{C}$ -NMRの化学シフトの予測を行うことができることになる。この結果、平面構造コード (C A N O S T)、立体配置コード (C o n f i g u r a t i o n) 及び立体配座コード (S t e r e o) を合わせて利用することにより、精度の高い $^{13}\text{C}$ -NMRの化学シフトの予測を行うことができる。

【0104】

また、分子を構成する複数の原子の個々の原子の回りの立体化学を取り入れて分子をコード化するための立体化学コード化方法を記載したプログラムをコンピ

ュータに読み取り可能記録媒体に記録することが可能である。

【0 1 0 5】

【発明の効果】

以上のように、本発明の構成によれば、立体配座や立体配置等の分子の立体構造環境の情報をコンピュータに読みとり可能に、規範的にコード化することができる。

【図面の簡単な説明】

【図 1】

a - G l c - 4 C をモデル分子として分子ツリー体とキャノスト線形表記（平面構造コード）形成する手順を示す図であり、（a）は、a - G l c - 4 C の立体配座を示し、（b）は階位分類工程における第 1 の分子ツリー体を示し、（c）は第 2 の分子ツリー体を示し、（d）は第 3 の分子ツリー体を示し、（e）はキャノスト線形表記（平面構造コード）を示す。

【図 2】

図 1（a）を拡大して示す図。

【図 3】

二面角を求める手順を説明する図。

【図 4】

キャノストコードリストを示す図。

【図 5】

a - G l c - 4 C - c h a i n をモデル分子として作成した分子ツリーとキャノスト線形表記を示す図。

【図 6】

二面角をその大きさに応じて記号付与するための角度分割規則を示す図。

【図 7】

s t a g g e r e d   t y p e (a) と e c l i p s e   t y p e (b) の立体配座を示す図。

【図 8】

立体配座コード作成工程をニューマン投影図で示す図。

【図 9】

立体配置コード ( c o n f i g u r a t i o n ) の求める手順を説明する図。

【図 1 0】

$s p^2$  タイプの原子に関して立体配座コードを求める手順を示す図。

【図 1 1】

$s p^2$  タイプの原子に関して立体配置コードを求める手順を示す図。

【図 1 2】

図 1 5 及び図 1 6 に示す分子に対する平面構造式 ( a ) と、図 1 8 に示す分子に対する平面構造式 ( b ) を示す図。

【図 1 3】

図 1 5 及び図 1 6 に示す分子に対する立体配置の一例 ( a ) と、図 1 8 に示す分子に対する立体配置の一例 ( b ) を示す図。

【図 1 4】

a - G l c - 4 C と a - G l c - 1 C の立体配座を比較して示す図。

【図 1 5】

分子の立体構造式を示す図。

【図 1 6】

分子の立体構造式を示す図。

【図 1 7】

分子の立体構造式を示す図。

【図 1 8】

分子の立体構造式を示す図。

【図 1 9】

分子の平面構造式を示す図。

【図 2 0】

a - G l c - 4 C の平面構造コード ( C A N O S T ) と、立体配座コード ( S t e r e o ) と、立体配置コード ( C o n f i g u r a t i o n ) を並記して示す図。

【図 2 1】

a-Glc-4Cの立体配座コード (S t e r e o) をマスキングしない場合とマスキングした場合について示す図。

【図22】

b-Glc-4Cの立体配座コード (S t e r e o) をマスキングしない場合とマスキングした場合について、a-Glc-4Cと比較した結果を示す図。

【図23】

図15及び図16に立体構造式を示す種々の分子に対して、スタート原子としてノード6とノード7の2個だけを選び求めた立体配座コード (S t e r e o) を比較して示す図。

【図24】

図15及び図16に立体構造式を示す種々の分子に対して、スタート原子としてノード6とノード7の2個だけを選び求めた立体配座コード (S t e r e o) を比較して示す図。

【図25】

図15及び図16に立体構造式を示す種々の分子に対して、スタート原子としてノード6とノード7の2個だけを選び求めた立体配置コード (C o n f i g u r a t i o n) を比較して示す図。

【図26】

図18に立体構造式を示す種々の分子に対して、マスキングしない立体配座コード (S t e r e o) を比較して示す図。

【図27】

図18に立体構造式を示す種々の分子に対して、マスキングした立体配座コード (S t e r e o) を比較して示す図。

【図28】

図18に立体構造式を示す種々の分子に対して、立体配置コード (C o n f i g u r a t i o n) を比較して示す図。

【図29】

図19に化学式を示す種々の分子に対して、スタート原子としてBr原子とC1原子の2個だけを選び、立体配座コード (S t e r e o) と立体配置コード (



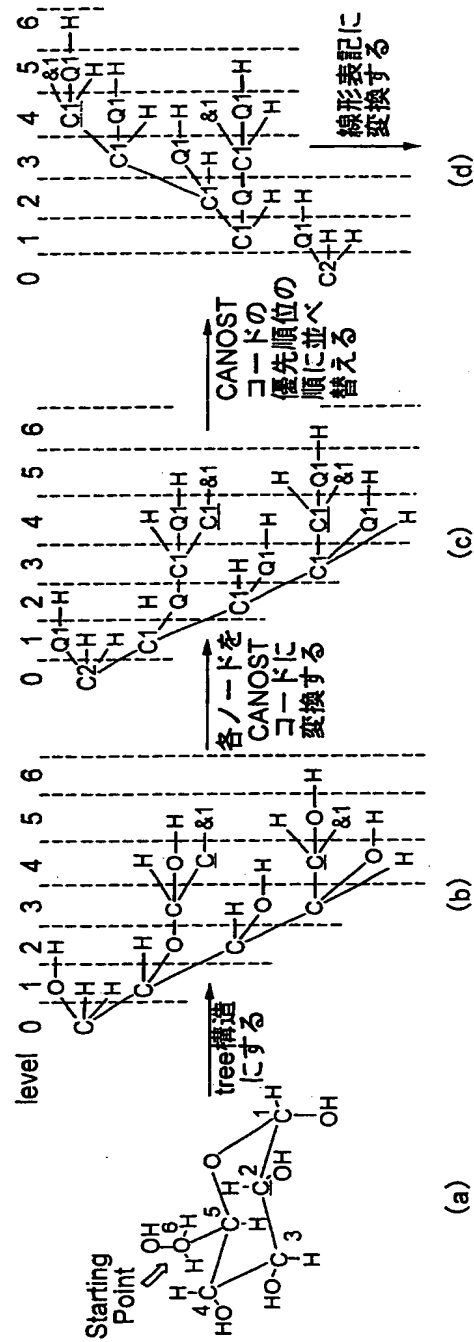
Configuration) を比較して示す図。

【図 30】

立体配座コード (Stereo) と立体配置コード (Configuration) の使用例を示す図。

【書類名】 図面

【図 1】

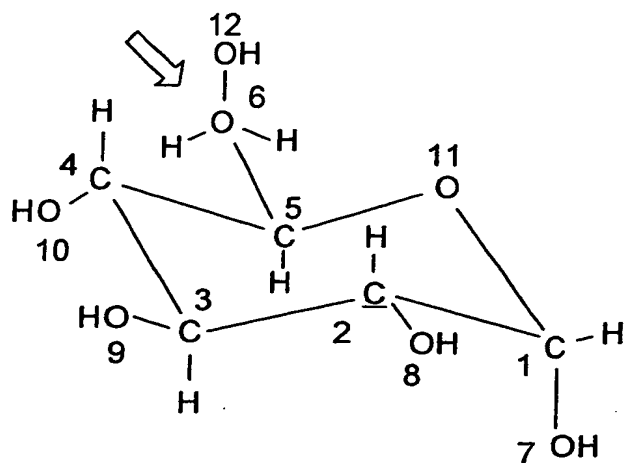


C2 \* C1 ; Q1 ; H ; H \* C1 ; Q ; H , H , , \* C1 ; Q1 ; H , C1 , , \* C1 ; Q1 ; H , H , , & 1 ; Q1 ; H \* & 1 ; Q1 ; H , H , , , H , \* , H , , , \*

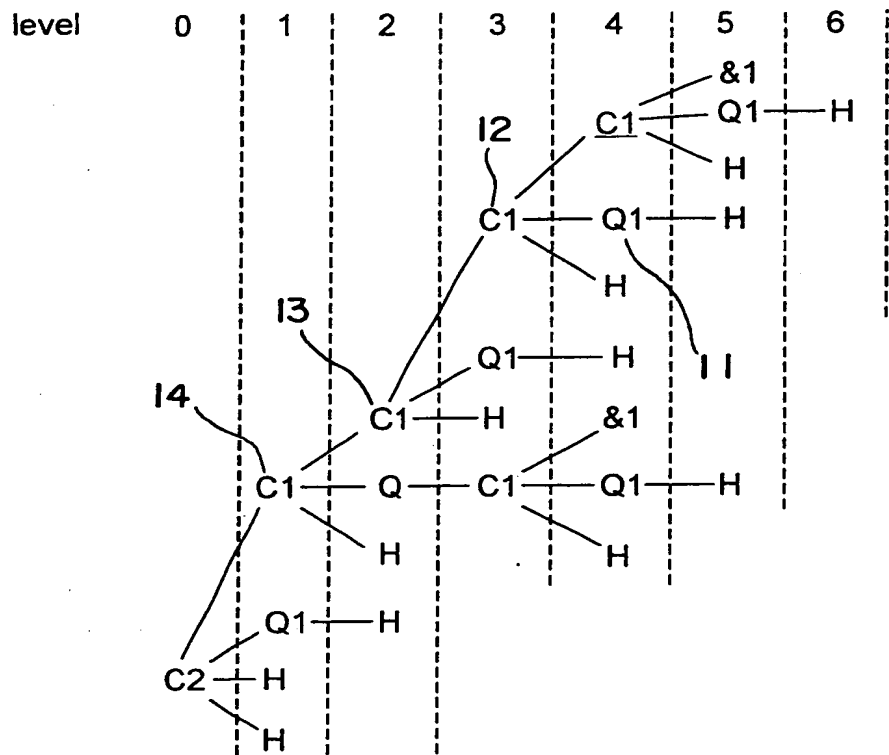
(e)

【図 2】

Starting point (スタート原子)

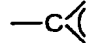
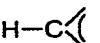
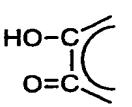


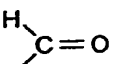




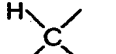
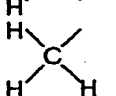


【図 3】



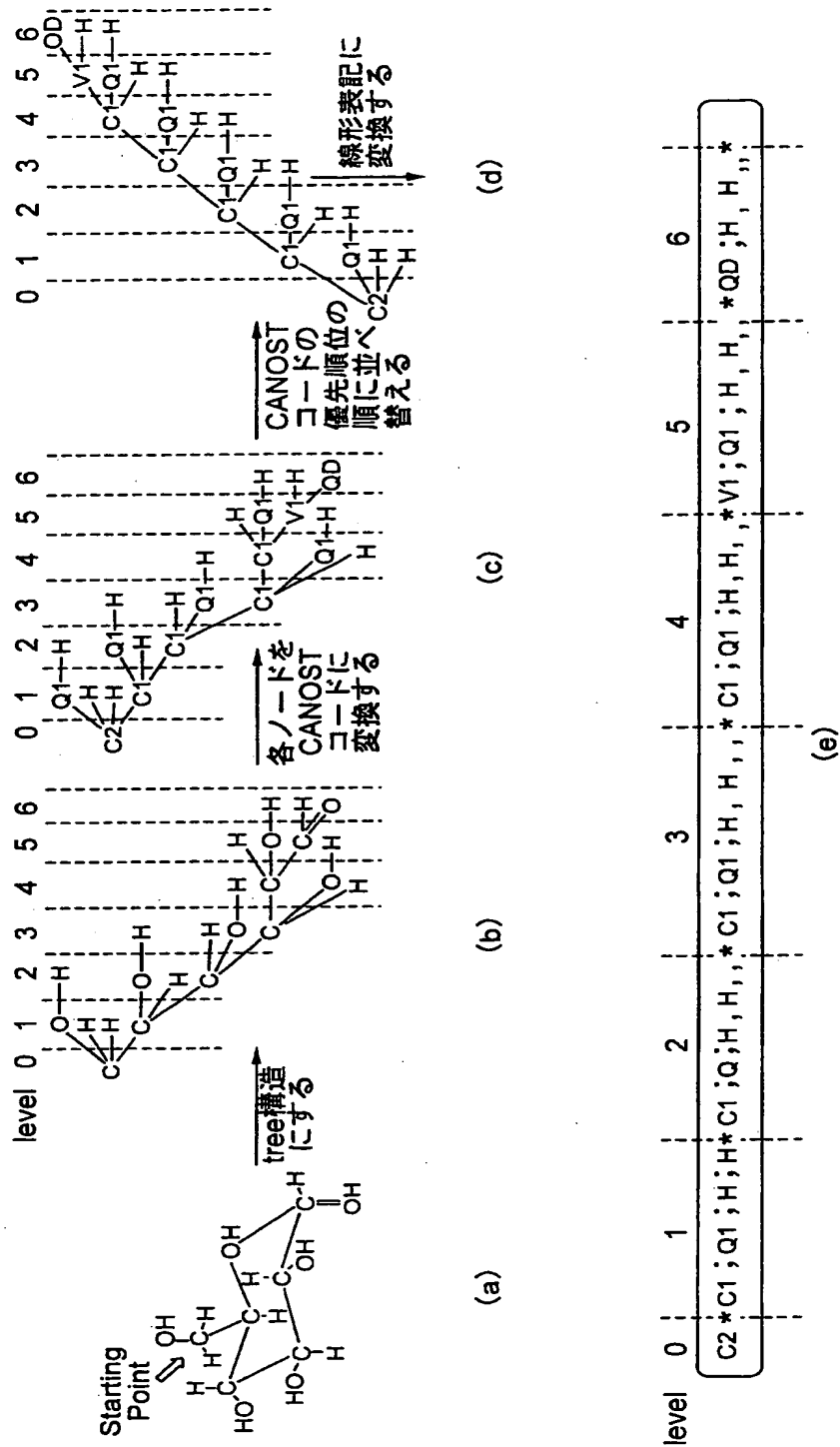
【図 4】

CANOST (modified) code list

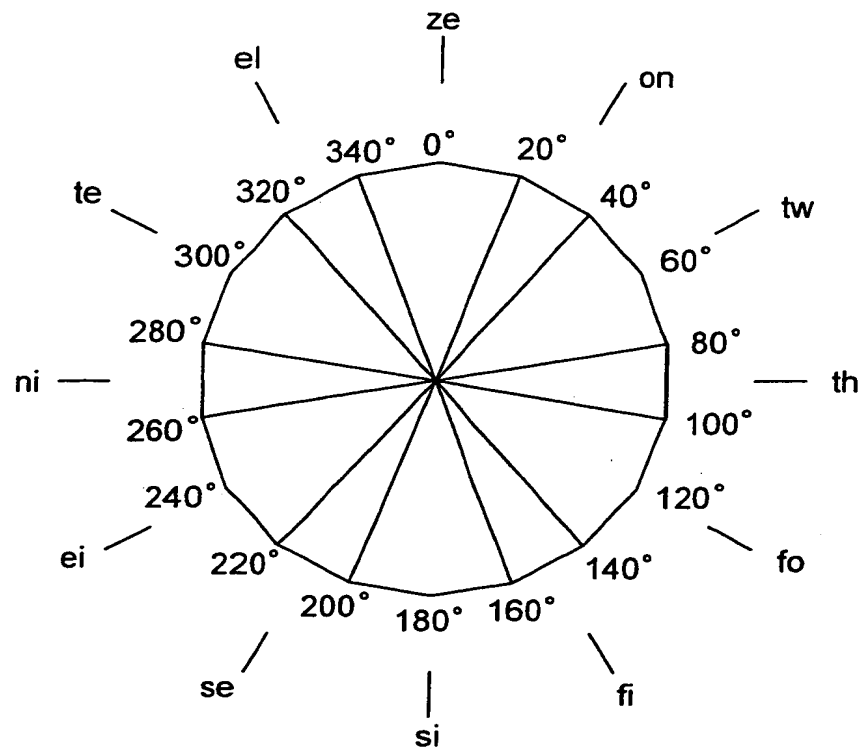
no	code	substructure	no.	code	substructure	no.	code	substructure
1 <sup>a)</sup>	&nc	code for ring closing	12 <sup>b)</sup>	Y		22	LF	$\text{—F}$
2	T	$\text{—C}\equiv$	13 <sup>c)</sup>	Y1		23	LC	$\text{—Cl}$
3	T1	$\text{H—C}\equiv$	14 <sup>d)</sup>	YTT		24	LB	$\text{—Br}$
4	DD	$\text{=C=}$				25	LJ	$\text{—I}$
5	DS		15	V	$\text{>C=O}$	26	X	other atom
6	D1		16	V1		27 <sup>e)</sup>	XR	$\text{X}\langle$
7	D2		17	VD	$\text{=C=O}$	28	XW	
8	C		18	QD	$\text{=O}$	29	XD	$\text{=X}$
9	C1		19	Q	$\text{=O—}$	30	XN	$\text{=X=}$
10	C2		20	Q1	$\text{—O—H}$	31	XT	$\equiv\text{X}$
11	C3		21	Q0	$\text{—O}^-$	32 <sup>f)</sup>	Xnp	$\text{XH}_{np}$
						33	H	$\text{—H}$

- a) A cn is a serial no. of the closing site.  
 b) Aromatic carbon without hydrogen.  
 c) Aromatic carbon with hydrogen.  
 d)  $\text{—C(OH)—C(O)—}$  in troponoid.  
 e) Non-carbon atom in aromatic structure.  
 f) A np is the number of connecting hydrogens.

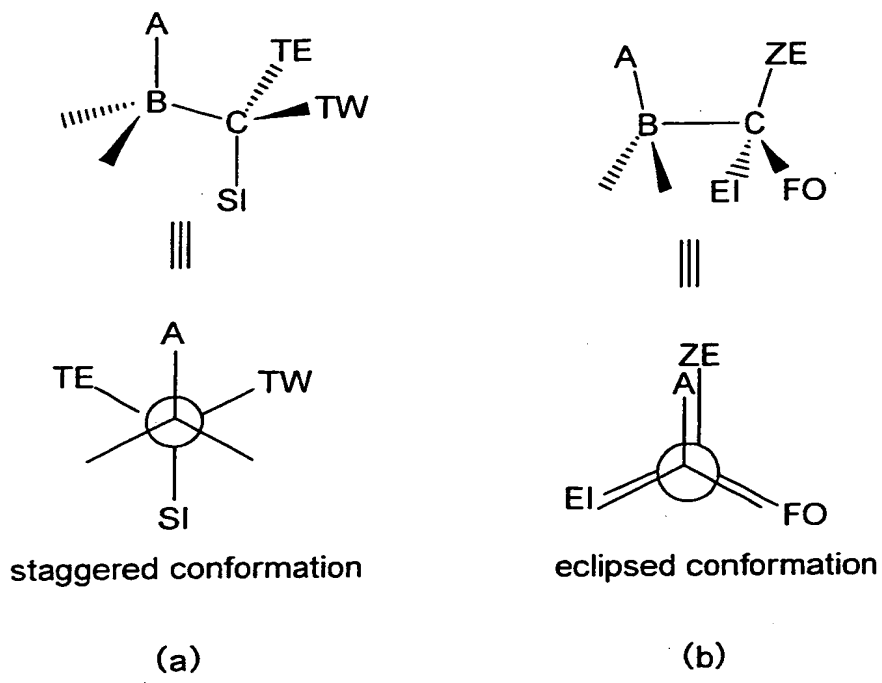
【図 5】



【图 6】

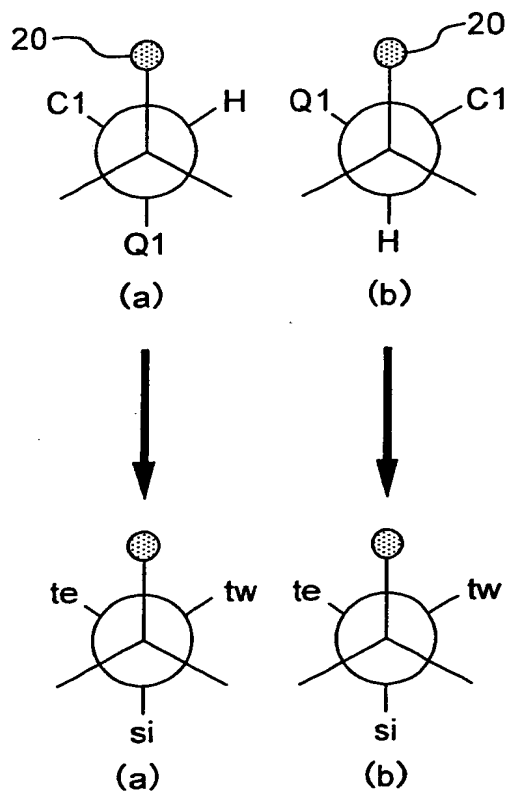


【图 7】



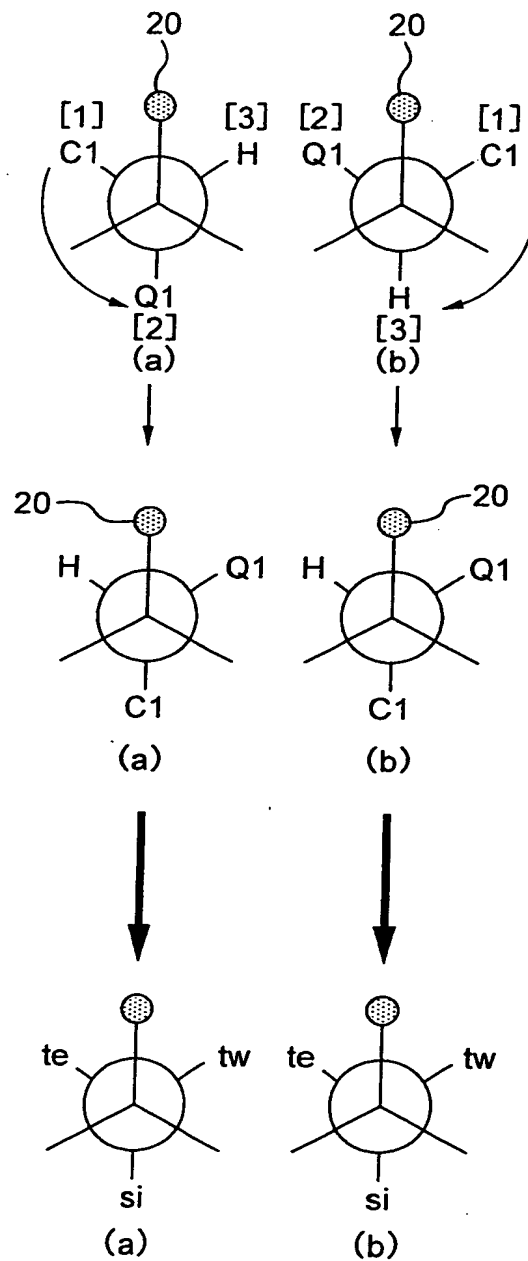


【図 8】



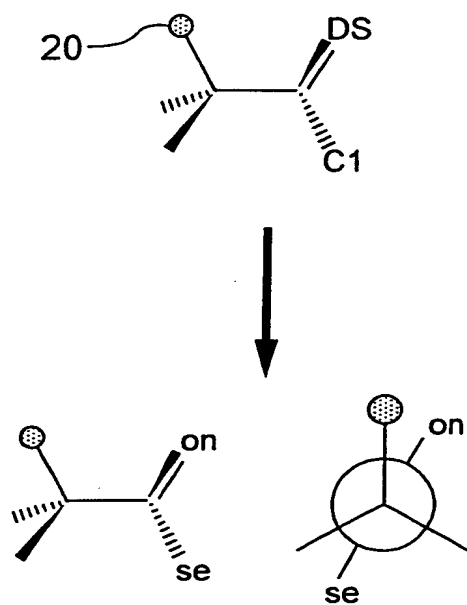
CANOSTコード	C1;Q1;H,
STEREOコード (a)	te;si;tw
STEREOコード (b)	tw;te;si

【図 9】



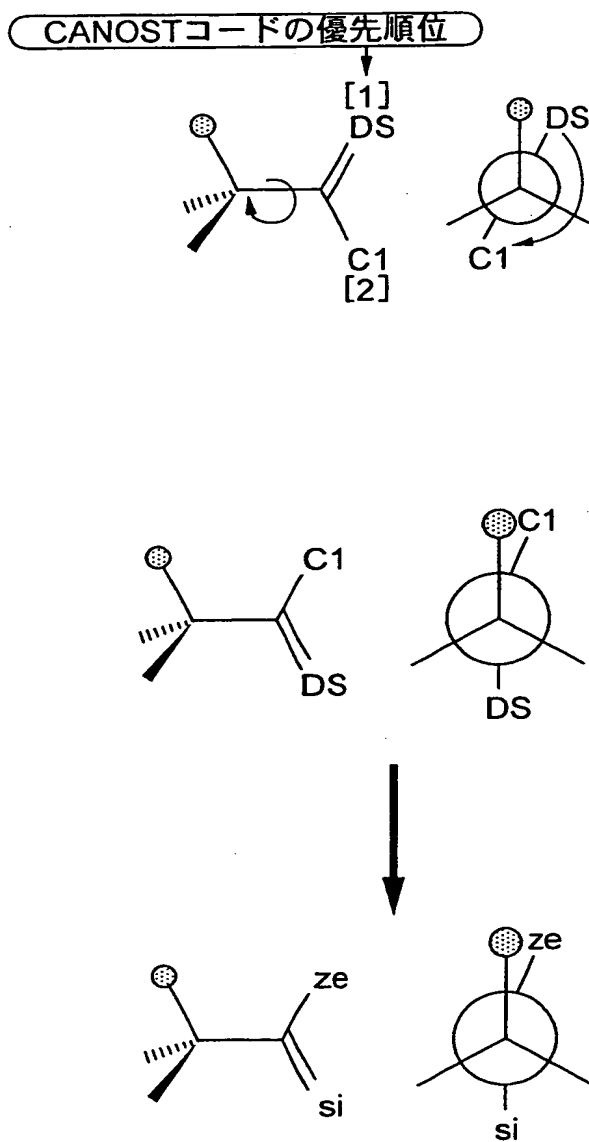
CANOSTコード	C1;Q1;H,
configuration識別コード (a)	si;tw;te
configuration識別コード (b)	si;tw;te

【図 1 0】



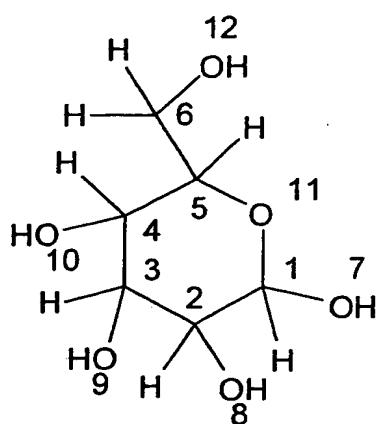
CANOSTコード	DS;C1
STEREOコード	on;se

【図 1 1】



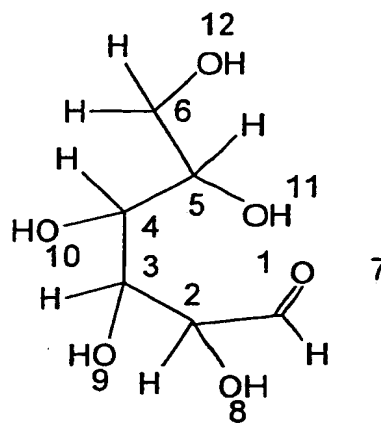
CANOSTコード	DS;C1
configuration 識別コード	si;ze

【図 1 2】



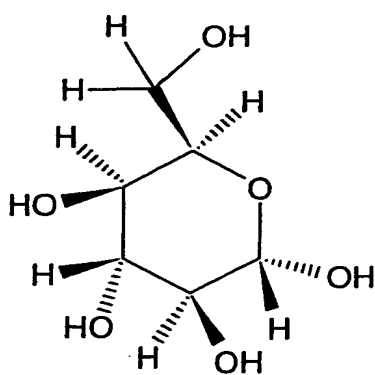
(a)

Planar Structures



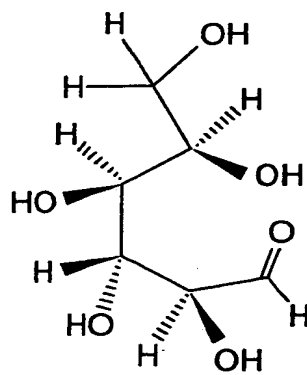
(b)

【図 1 3】



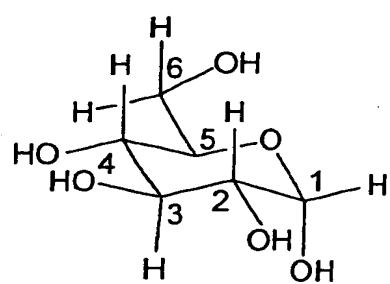
(a)

Configuration



(b)

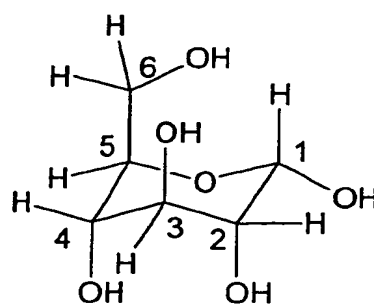
【図 1 4】



4C

(a)

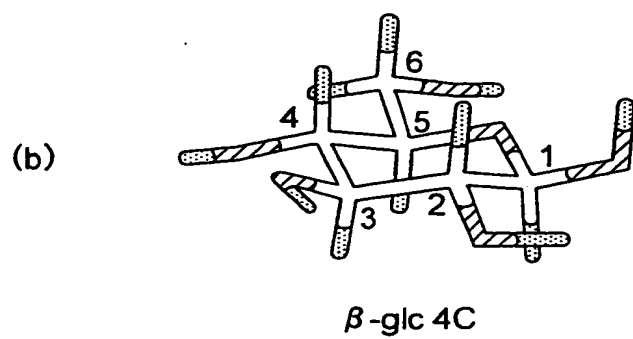
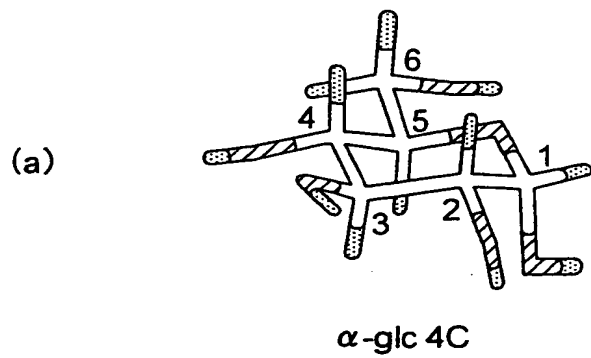
Conformation



1C

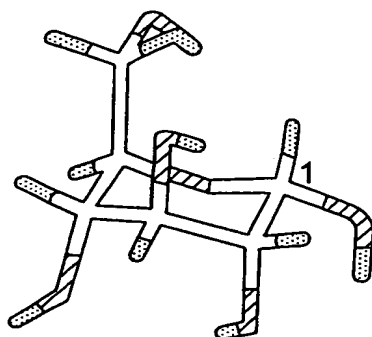
(b)

【図 1 5】



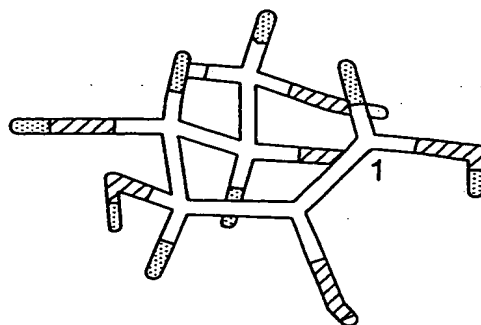
【図 1 6】

(a)



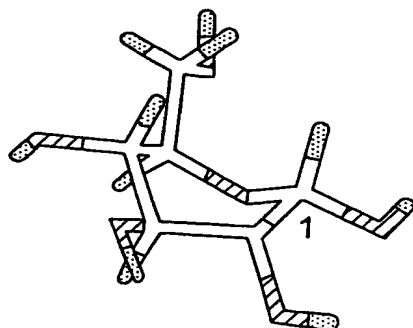
$\alpha$ -glc 1C

(b)



$\alpha$ -glc 14B

(c)

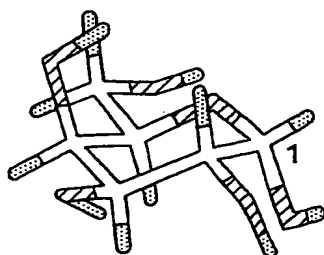


$\alpha$ -glc 14TW



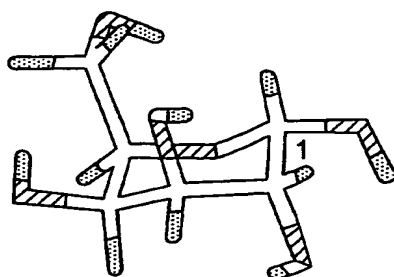
【図 1 7】

(a)



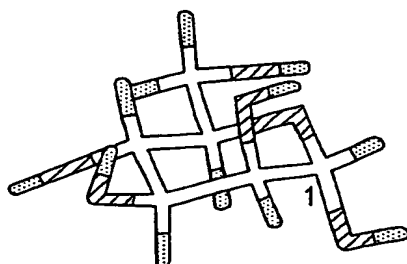
$\alpha$ -gal 4C

(b)



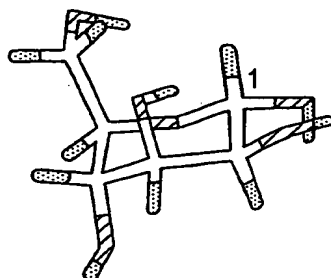
$\alpha$ -gal 1C

(c)



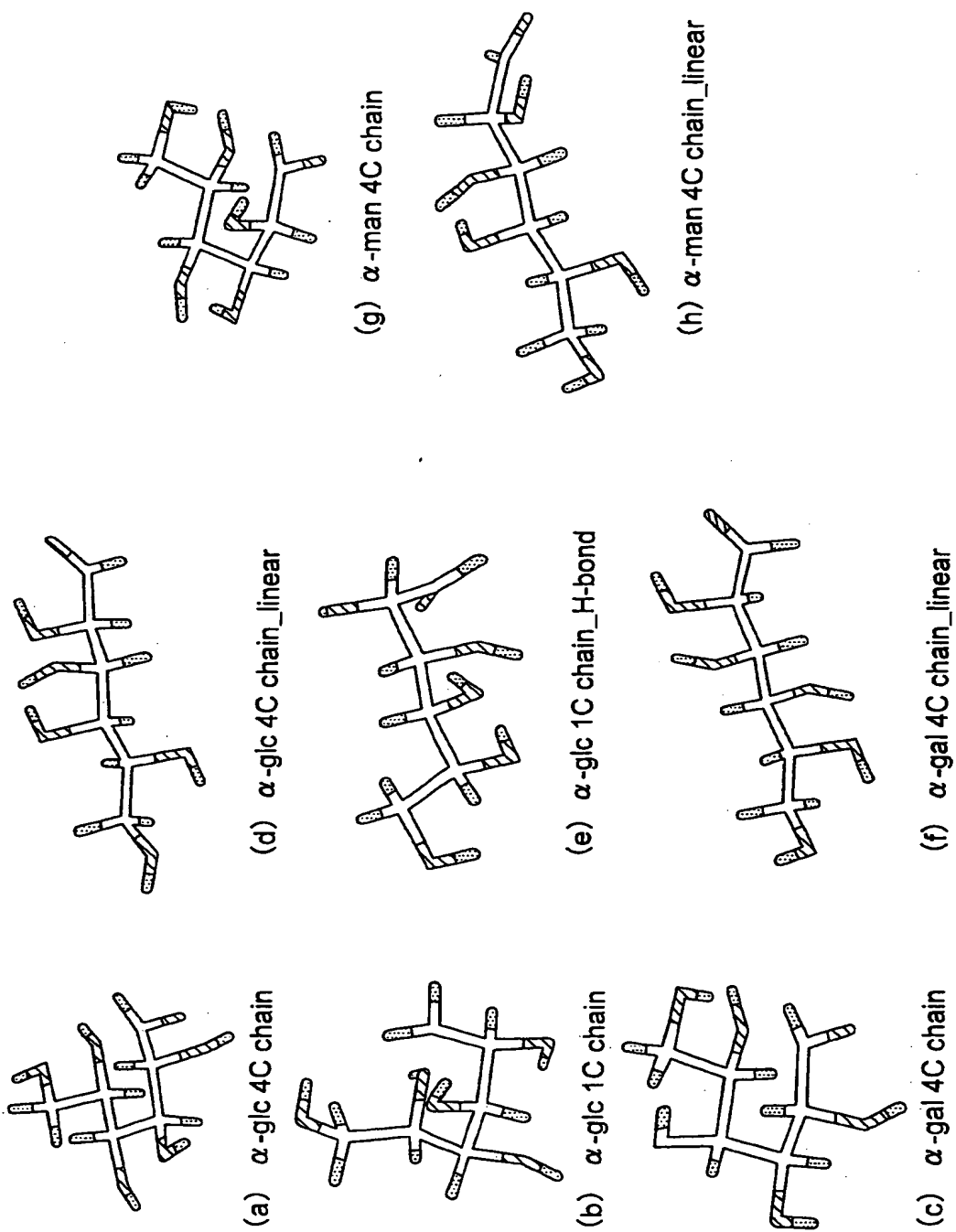
$\alpha$ -man 4C

(d)

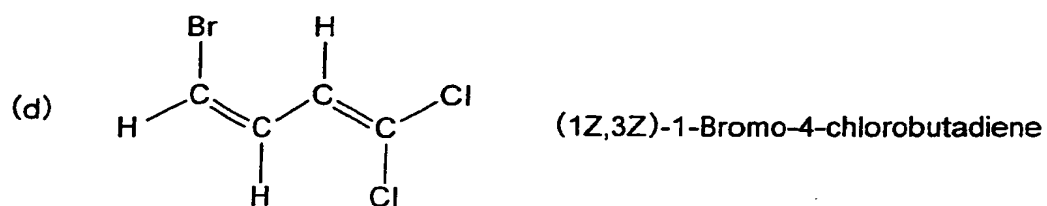
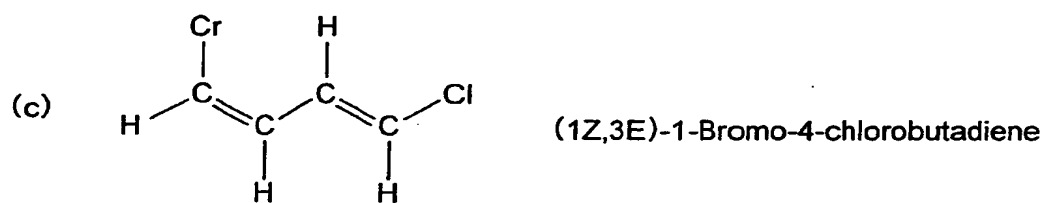
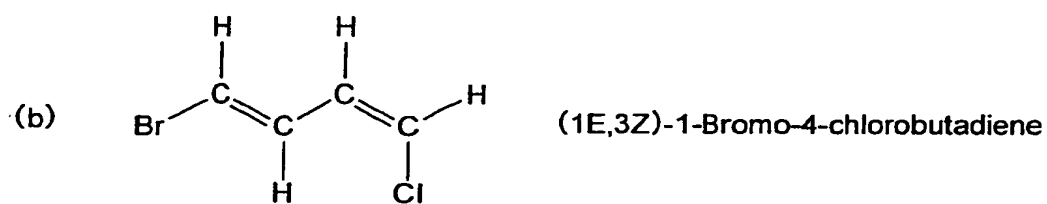
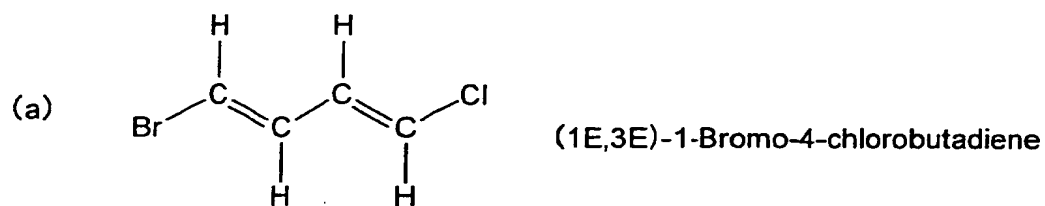


$\alpha$ -man 1C

【图 1 8】



【図 1 9】



## 【図 2 0】

α-Glc-4C

CANOST

```

1 C1*C1;Q;Q1;H*C1;Q1;H,C1,H,*C1;Q1;H,H,,&1;C2;H,*&1;Q1;H,H,,,Q1;H;H,*H,,,H,,*
2 C1*C1;C1;Q1;H*C1;Q1;H,Q;Q1;H,H,*C1;Q1;H,H,,&1;H,,*&1;C2;H,H,,,*,Q1;H;H,*H,,*
3 C1*C1;C1;Q1;H*C1;Q1;H,C1;Q1;H,H,*C2;Q;H,H,,&1;Q1;H,H,,*Q1;H;H,&1,,,H,,*H,,,*
4 C1*C1;C1;Q1;H*C1;Q1;H,C2;Q;H,H,*C1;Q1;H,H,,Q1;H;H,&1,,*&1;Q1;H,H,,,H,,,*,H,,,*
5 C1*C1;C2;Q;H*C1;Q1;H,Q1;H;H,C1,*C1;Q1;H,H,,H,,&1;Q1;H*&1;Q1;H,H,,,H,*H,,,*
6 C2*C1;Q1;H;H*C1;Q;H,H,,*C1;Q1;H,C1,,*C1;Q1;H,H,,&1;Q1;H*&1;Q1;H,H,,,H,*H,,,*
7 Q1*C1;H*C1;Q;H,*C1;Q1;H,C1,*C1;Q1;H,H,,&1;C2;H*&1;Q1;H,H,,,Q1;H;H,*H,,,H,,*
8 Q1*C1;H*C1;C1;H,*C1;Q1;H,Q;Q1;H,*C1;Q1;H,H,,&1;H,*&1;C2;H,H,,,*,Q1;H;H,*H,,*
9 Q1*C1;H*C1;C1;H,*C1;Q1;H,C1;Q1;H,*C2;Q;H,H,,&1;Q1;H,H,*Q1;H;H,&1,,,H,,*H,,,*
10 Q1*C1;H*C1;C1;H,*C1;Q1;H,C2;Q;H,*C1;Q1;H,H,,Q1;H;H,&1,*&1;Q1;H,H,,,H,,,*,H,,,*
11 Q*C1;C1*C1;C2;H,C1;Q1;H*C1;Q1;H,Q1;H;H,,&1;Q1;H,H,*&1;Q1;H,H,,,H,,,*,H,,,*
12 Q1*C2;H*C1;H;H,*C1;Q;H,,*C1;Q1;H,C1,*C1;Q1;H,H,,&1;Q1;H*&1;Q1;H,H,,,H,*H,,,*

```

Stereo

```

1 A*B;B;B;B*C;C;C,C,C,*te;si;tw,te,,tw;si;te,*&1;si;te,te,,,tw;te;si,*tw,,te,,*
2 A*B;B;B;B*C;C;C,C,C;C,C,*tw;si;te,te,,te,si,,*&1;si;tw,tw,,,*,si;tw;te,,*te,,*
3 A*B;B;B;B*C;C;C,C,C;C,C,*si;te;tw,tw,,tw;te;si,tw,,*si;tw;te,&1,,,si,,*te,,,*
4 A*B;B;B;B*C;C;C,C,C;C,C,*te;si;tw,si,,si;tw;te,tw,,*&1;te;si,tw,,te,,,*,si,,,*
5 A*B;B;B;B*C;C;C,C,C;C,C,*tw;si;te,si,,te,,,te;tw;si*&1;si;tw,si,,,tw,,*tw,,,*
6 A*B;B;B;B*C;C;C,C,,*si;tw;te,si,,*tw;si;te,si,,te;tw;si*&1;si;tw,si,,,tw,,*tw,,,*
7 A*B;B*C;C;C,*te;tw;si,tw,*te;si;tw,te,,tw;si;te*&1;si;te,te,,,tw;te;si,*tw,,te,,*
8 A*B;B*C;C;C,*si;tw;te,si;tw;te,*tw;si;te,te,,te,si,*&1;si;tw,tw,,,*,si;tw;te,,*te,,*
9 A*B;B*C;C;C,*si;te;tw,si;tw;te,*si;te;tw,tw,,tw;te;si,tw,*si;tw;te,&1,,,si,,*te,,,*
10 A*B;B*C;C;C,*si;te;tw,tw;si;te,*te;si;tw,si,,si;tw;te,tw,*&1;te;si,tw,,te,,,*,si,,,*
11 A*B;B*C;C;C;C;C,*te;si;tw,tw;te;si,,tw;si;te,tw,*&1;si;te,si,,te,,,te,,,*,si,,,*
12 A*B;B*C;C;C,*si;tw;te,,*si;tw;te,si,*tw;si;te,si,,te;tw;si*&1;si;tw,si,,,tw,,*tw,,,*

```

Configuration

```

1 A*B;B;B;B*C;C;C,C,C,*si;tw;te,si,,si;te;tw,*si;te;tw,si,,,si;tw;te,*si,,,si,,*
2 A*B;B;B;B*C;C;C,C,C;C,C,*si;te;tw,si,,si,si,,*si;tw;te,si,,,*,si;tw;te,,*si,,*
3 A*B;B;B;B*C;C;C,C,C;C,C,*si;te;tw,si,,si;tw;te,si,,*si;tw;te,&1,,,si,,*si,,,*
4 A*B;B;B;B*C;C;C,C,C;C,C,*si;tw;te,si,,si;tw;te,si,,*si;tw;te,si,,,si,,,*,si,,,*
5 A*B;B;B;B*C;C;C,C,C;C,C,*si;te;tw,si,,si,,si;te;tw*si;tw;te,si,,,si,,*si,,,*
6 A*B;B;B;B*C;C;C,C,,*si;tw;te,si,,*si;te;tw,si,,si;te;tw*si;tw;te,si,,,si,,*si,,,*
7 A*B;B*C;C;C,*si;te;tw,si,*si;tw;te,si,,si;te;tw*si;te;tw,si,,,si;tw;te,*si,,,si,,*
8 A*B;B*C;C;C,*si;tw;te,si;tw;te,*si;te;tw,si,,si,si,*si;tw;te,si,,,*,si;tw;te,,*si,,*
9 A*B;B*C;C;C,*si;te;tw,si;tw;te,*si;te;tw,si,,si;tw;te,si,*si;tw;te,&1,,,si,,*si,,,*
10 A*B;B*C;C;C,*si;te;tw,si;te;tw,*si;tw;te,si,,si;tw;te,si,*si;tw;te,si,,,si,,,*,si,,,*
11 A*B;B*C;C;C;C;C,*si;tw;te,si;tw;te,,si;te;tw,si,*si;te;tw,si,,si,,,si,,,*,si,,,*
12 A*B;B*C;C;C,*si;tw;te,,*si;tw;te,si,*si;te;tw,si,,si;te;tw*si;tw;te,si,,,si,,*si,,,*

```

【図 2 1】

α-gluc-4C

Stereo

- 1 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,C,\*te;si;tw,te,,tw;si;te,\*&l;si;te,te,,,tw;te;si,,tw,,,te,,
- 2 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,C;C,C,\*tw;si;te,te,,te,si,,\*&l;si;tw,tw,,,\*,si;tw;te,,\*te,,
- 3 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,C;C,C,\*si;te;tw,tw,,tw;te;si,tw,,\*si;tw;te,&l,,,si,,\*te,,,
- 4 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,C;C,C,\*te;si;tw,si,,si;tw;te,tw,,\*&l;te;si,tw,,,te,,,\*,si,,,
- 5 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,C;C,C,\*tw;si;te,si,,te,,,te;tw;si\*&l;si;tw,si,,,,tw,,\*tw,,,
- 6 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,,\*si;tw;te,si,,\*tw;si;te,si,,te;tw;si\*&l;si;tw,si,,,,tw,,\*tw,,,
- 7 A\*B;B\*C;C;C,\*te;tw;si,tw,\*te;si;tw,te,,tw;si;te\*&l;si;te,te,,,tw;te;si,,tw,,,te,,
- 8 A\*B;B\*C;C;C,\*si;tw;te,si;tw;te,\*tw;si;te,te,,te,si,\*&l;si;tw,tw,,,\*,si;tw;te,,\*te,,
- 9 A\*B;B\*C;C;C,\*si;te;tw,si;tw;te,\*si;te;tw,tw,,tw;te;si,tw,\*si;tw;te,&l,,,si,,\*te,,,
- 10 A\*B;B\*C;C;C,\*si;te;tw,tw;si;te,\*te;si;tw,si,,si;tw;te,tw,\*&l;te;si,tw,,,te,,,\*,si,,,
- 11 A\*B;B\*C;C;C,C;C;C,\*te;si;tw,tw;te;si,,tw;si;te,tw,\*&l;si;te,si,,te,,,te,,,\*,si,,,
- 12 A\*B;B\*C;C;C,\*si;tw;te,,\*si;tw;te,si,\*tw;si;te,si,,te;tw;si\*&l;si;tw,si,,,,tw,,\*tw,,,

α-gluc-4C

Stereo(CH<sub>2</sub>→H)

- 1 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,C,\*te;si;tw,te,,tw;si;te,\*&l;si;te,te,,,tw;H;H,,tw,,,te,,
- 2 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,C;C,C,\*tw;si;te,te,,te,si,,\*&l;si;tw,tw,,,\*,si;H;H,,\*te,,
- 3 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,C;C,C,\*si;te;tw,tw,,tw;te;si,tw,,\*si;H;H,&l,,,si,,\*te,,,
- 4 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,C;C,C,\*te;si;tw,si,,si;H;H,tw,,\*&l;te;si,tw,,,te,,,\*,si,,,
- 5 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,C;C,C,\*tw;si;te,si,,te,,,te;tw;si\*&l;si;tw,si,,,,tw,,\*tw,,,
- 6 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,,\*si;tw;te,si,,\*tw;si;te,si,,te;tw;si\*&l;si;tw,si,,,,tw,,\*tw,,,
- 7 A\*B;B\*C;C;C,\*te;tw;si,tw,\*te;si;tw,te,,tw;si;te\*&l;si;te,te,,,tw;H;H,,tw,,,te,,
- 8 A\*B;B\*C;C;C,\*si;tw;te,si;tw;te,\*tw;si;te,te,,te,si,\*&l;si;tw,tw,,,\*,si;H;H,,\*te,,
- 9 A\*B;B\*C;C;C,\*si;te;tw,si;tw;te,\*si;te;tw,tw,,tw;te;si,tw,\*si;H;H,&l,,,si,,\*te,,,
- 10 A\*B;B\*C;C;C,\*si;te;tw,tw;si;te,\*te;si;tw,si,,si;H;H,tw,\*&l;te;si,tw,,,te,,,\*,si,,,
- 11 A\*B;B\*C;C;C,C;C;C,\*te;si;tw,tw;H;H,,tw;si;te,tw,\*&l;si;te,si,,te,,,te,,,\*,si,,,
- 12 A\*B;B\*C;C;C,\*si;tw;te,,\*si;tw;te,si,\*tw;si;te,si,,te;tw;si\*&l;si;tw,si,,,,tw,,\*tw,,,

α-Glc-4C

Stereo(CH<sub>2</sub>→H, OH→OH)

- 1 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,C,\*te;si;tw,OH,,tw;si;te,\*&l;si;te,OH,,,tw;H;H,,OH,,,OH,,
- 2 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,C;C,C,\*tw;si;te,OH,,te,OH,,\*&l;si;tw,OH,,,\*,si;H;H,,\*OH,,
- 3 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,C;C,C,\*si;te;tw,OH,,tw;te;si,OH,,\*si;H;H,&l,,,OH,,\*OH,,,
- 4 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,C;C,C,\*te;si;tw,OH,,si;H;H,tw,,\*&l;te;si,OH,,,OH,,,\*,OH,,,
- 5 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,C;C,C,\*tw;si;te,OH,,OH,,te;tw;si\*&l;si;tw,OH,,,OH,,\*OH,,,
- 6 A\*B;B;B;B\*C;C;C,C,,\*si;tw;te,si,,\*tw;si;te,OH,,te;tw;si\*&l;si;tw,OH,,,OH,,\*OH,,,
- 7 A\*B;B\*C;C;C,\*te;tw;si,OH,\*te;si;tw,te,,tw;si;te\*&l;si;te,OH,,,tw;H;H,,\*OH,,,
- 8 A\*B;B\*C;C;C,\*si;tw;te,si;tw;te,\*tw;si;te,OH,,te,OH,\*&l;si;tw,OH,,,\*,si;H;H,,\*OH,,
- 9 A\*B;B\*C;C;C,\*si;te;tw,si;tw;te,\*si;te;tw,OH,,tw;te;si,OH,\*si;H;H,&l,,,OH,,\*OH,,,
- 10 A\*B;B\*C;C;C,\*si;te;tw,tw;si;te,\*te;si;tw,OH,,si;H;H,tw,\*&l;te;si,OH,,,OH,,,\*,OH,,,
- 11 A\*B;B\*C;C;C,C;C;C,\*te;si;tw,tw;H;H,,tw;si;te,OH,\*&l;si;te,OH,,,OH,,,\*,OH,,,
- 12 A\*B;B\*C;C;C,\*si;tw;te,,\*si;tw;te,si,\*tw;si;te,OH,,te;tw;si\*&l;si;tw,OH,,,OH,,\*OH,,,

【図 2 2】

b-Glc-4C

Stereo

```

1  A*B:B*B*B*C:C:C.C.C.*te:si:tw,tw.,tw:si:te,&l:si:te,te,...tw:si:te,*,tw,...te,*,
2  A*B:B*B*B*C:C:C.C.C.C.*tw:si:te,te.,te.ni.,&l:si:tw,tw,...*,si:te,tw.,*te,...*
3  A*B:B*B*B*C:C:C.C.C.C.*si:te:tw,tw.,tw:si:te,si.,*si:te,tw,&l,...ni.,*te,...*
4  A*B:B*B*B*C:C:C.C.C.C.*te:si:tw,si.,si:te,tw,tw.,&l:si:te,si,...te,...*,ni,...*
5  A*B:B*B*B*C:C:C.C.C.C.*tw:si:te,si.,te,...te:si:tw&l:si:tw,si,...on,*,si,...*
6  A*B:B*B*B*C:C:C.C.C.*si:tw:te,si.,*tw:si:te,si.,te:si:tw&l:si:tw,si,...on,*,si,...*
7  A*B:B*B*B*C:C.C.*si:te:tw,si,*te:si:tw,tw.,tw:si:te&l:si:te,te,...tw:si:te,*,tw,...te,...*
8  A*B:B*B*B*C:C.C.*si:tw:te,si:te,tw,*tw:si:te,te.,te.ni.,&l:si:tw,tw,...*,si:te,tw.,*te,...*
9  A*B:B*B*B*C:C.C.*si:te:tw,si:tw:te,*si:te:tw,tw.,tw:si:te,si,*si:te,tw,&l,...ni.,*te,...*
10 A*B:B*B*B*C:C.C.*si:te:tw,tw:si:te,*te:si:tw,si.,si:te,tw,tw,&l:si:te,si,...te,...*,ni,...*
11 A*B:B*B*B*C:C.C.C.*te:si:tw,tw:si:te,te,*,&l:si:te,si.,te,...tw,...*,si,...*
12 A*B:B*B*B*C:C.C.*si:tw:te,...*si:tw:te,si,*tw:si:te,si.,te:si:tw&l:si:tw,si,...on,*,si,...*

```

b-Glc-4C

Stereo (CH2→H)

```

1  A*B:B*B*B*C:C:C.C.C.*te:si:tw,tw.,tw:si:te,&l:si:te,te,...tw:H:H,*,tw,...te,...*
2  A*B:B*B*B*C:C:C.C.C.C.*tw:si:te,te.,te.ni.,&l:si:tw,tw,...*,si:H:H,*,te,...*
3  A*B:B*B*B*C:C:C.C.C.C.*si:te:tw,tw.,tw:si:te,si.,*si:H:H,&l,...ni.,*te,...*
4  A*B:B*B*B*C:C:C.C.C.C.*te:si:tw,si.,si:H:H,tw.,&l:si:te,si,...te,...*,ni,...*
5  A*B:B*B*B*C:C:C.C.C.C.*tw:si:te,si.,te,...te:si:tw&l:si:tw,si,...on,*,si,...*
6  A*B:B*B*B*C:C:C.C.C.*si:tw:te,si.,*tw:si:te,si.,te:si:tw&l:si:tw,si,...on,*,si,...*
7  A*B:B*B*B*C:C.C.*si:te:tw,si,*te:si:tw,tw.,tw:si:te&l:si:te,te,...tw:H:H,*,tw,...te,...*
8  A*B:B*B*B*C:C.C.*si:tw:te,si:te,tw,*tw:si:te,te.,te.ni.,&l:si:tw,tw,...*,si:H:H,*,te,...*
9  A*B:B*B*B*C:C.C.*si:te:tw,si:tw:te,*si:te:tw,tw.,tw:si:te,si,*si:H:H,&l,...ni.,*te,...*
10 A*B:B*B*B*C:C.C.*si:te:tw,tw:si:te,*te:si:tw,si.,si:H:H,tw,&l:si:te,si,...te,...*,ni,...*
11 A*B:B*B*B*C:C.C.C.*te:si:tw,tw:H:H,*,tw:si:te,te,*,&l:si:te,si.,te,...tw,...*,si,...*
12 A*B:B*B*B*C:C.C.*si:tw:te,...*si:tw:te,si,*tw:si:te,si.,te:si:tw&l:si:tw,si,...on,*,si,...*

```

b-Glc-4C

Stereo (CH2→H, OH→OH)

```

1  A*B:B*B*B*C:C:C.C.C.*te:si:tw,OH.,tw:si:te,&l:si:te,OH,...tw:H:H,*,OH,...OH,...*
2  A*B:B*B*B*C:C:C.C.C.C.*tw:si:te,OH.,te,OH.,&l:si:tw,OH,...*,si:H:H,*,OH,...*
3  A*B:B*B*B*C:C:C.C.C.C.*si:te:tw,OH.,tw:si:te,OH.,*si:H:H,&l,...OH,...OH,...*
4  A*B:B*B*B*C:C:C.C.C.C.*te:si:tw,OH.,si:H:H,tw.,&l:si:te,OH,...OH,...*,OH,...*
5  A*B:B*B*B*C:C:C.C.C.C.*tw:si:te,OH.,OH.,te:si:tw&l:si:tw,OH,...OH,...OH,...*
6  A*B:B*B*B*C:C.C.C.*si:tw:te,si.,*tw:si:te,OH.,te:si:tw&l:si:tw,OH,...OH,...OH,...*
7  A*B:B*B*B*C.C.*si:te:tw,OH,*te:si:tw,tw.,tw:si:te&l:si:te,OH,...tw:H:H,*,OH,...OH,...*
8  A*B:B*B*B*C.C.*si:tw:te,si:te,tw,*tw:si:te,OH.,te,OH.,&l:si:tw,OH,...*,si:H:H,*,OH,...*
9  A*B:B*B*B*C.C.*si:te:tw,si:tw:te,*si:te:tw,OH.,tw:si:te,OH,*si:H:H,&l,...OH,...OH,...*
10 A*B:B*B*B*C.C.*si:te:tw,tw:si:te,*te:si:tw,OH.,si:H:H,tw,&l:si:te,OH,...OH,...*,OH,...*
11 A*B:B*B*B*C.C.C.*te:si:tw,tw:H:H,*,tw:si:te,OH,&l:si:te,OH,...OH,...*,OH,...*
12 A*B:B*B*B*C.C.C.*si:tw:te,...*si:tw:te,si,*tw:si:te,OH.,te:si:tw&l:si:tw,OH,...OH,...*,OH,...*

```

【図 2 3】

a-Glc-4CとStereo codeを比較

a-Glc-4C

Stereo

6 A\*B:B:B\*B\*C:C:C.C.,\*si:lw:te,si,,\*tw:si:te,si,,te:lw:si\*&l:si:lw,si,...,tw,\*,tw,...,\*  
7 A\*B:B\*B\*C:C:C,\*te:lw:si, lw,\*te:si:lw, te,,lw:si:te\*&l:si:te, te,...,tw:te:si,\*, lw,...,te,,\*

a-Glc-1C

Stereo

6 A\*B:B:B\*B\*C:C:C.C.,\*te:si:lw, lw,,\*te:lw:si, si,,lw:si:te\*&l:le:si, si,...,ni,\*, lw,...,\*  
7 A\*B:B\*B\*C:C:C,\*si:te:lw, si,\*lw:te:si, te,,le:lw:si\*&l:lw:si, te,...,tw:te:si,\*, lw,...,te,,\*

a-Glc-14B

Stereo

6 A\*B:B:B\*B\*C:C:C.C.,\*si:lw:te, fo,,\*tw:si:te, si,,lw:si:te\*&l:ei:fo, si,...,ni,\*, lw,...,\*  
7 A\*B:B\*B\*C:C:C,\*si:te:lw, si,\*ze:ei:fo, te,,ze:fo:ei\*&l:si:te, te,...,tw:te:si,\*, lw,...,te,,\*

a-Glc-14TB

Stereo

6 A\*B:B:B\*B\*C:C:C.C.,\*se:th:el, th,,\*tw:si:te, si,,lw:si:te\*&l:se:th, si,...,tw,\*, fi,...,\*  
7 A\*B:B\*B\*C:C:C,\*se:el:th, si,\*el:se:th, on,,el:th:se\*&l:si:te, te,...,tw:te:si,\*, on,...,si,...,\*

b-Glc-4C

Stereo

6 A\*B:B:B\*B\*C:C:C.C.,\*si:lw:te, si,,\*tw:si:te, si,,te:si:lw\*&l:si:lw, si,...,on,\*, si,...,\*  
7 A\*B:B\*B\*C:C:C,\*si:te:lw, si,\*te:si:lw, lw,,lw:si:te\*&l:si:te, te,...,tw:si:te,\*, lw,...,te,,\*

a-Gal-4C

Stereo

6 A\*B:B:B\*B\*C:C:C.C.,\*si:le:lw, si,,\*tw:si:te, le,,te:lw:si\*&l:si:lw, si,...,tw,\*, lw,...,\*  
7 A\*B:B\*B\*C:C:C,\*te:lw:si, lw,\*te:si:lw, te,,lw:si:te\*&l:te:si, te,...,tw:si:te,\*, lw,...,te,,\*

a-Gal-1C

Stereo

6 A\*B:B:B\*B\*C:C:C.C.,\*te:lw:si, lw,,\*te:lw:si, ni,,lw:si:te\*&l:le:si, si,...,ni,\*, th,...,\*  
7 A\*B:B\*B\*C:C:C,\*si:te:lw, si,\*lw:te:si, te,,le:lw:si\*&l:si:lw, te,...,tw:si:te,\*, on,...,el,...,\*

a-Man-4C

Stereo

6 A\*B:B:B\*B\*C:C:C.C.,\*si:lw:te, si,,\*tw:si:te, si,,te:lw:si\*&l:lw:si, ni,...,tw,\*, si,...,\*  
7 A\*B:B\*B\*C:C:C,\*te:si:lw, lw,\*te:si:lw, te,,lw:si:te\*&l:si:te, on,...,lw:si:te,\*, lw,...,te,,\*

a-Man-1C

Stereo

6 A\*B:B:B\*B\*C:C:C.C.,\*te:si:lw, lw,,\*te:lw:si, si,,lw:si:te\*&l:si:te, si,...,el,\*, si,...,\*  
7 A\*B:B\*B\*C:C:C,\*si:lw:te, si,\*lw:te:si, te,,le:lw:si\*&l:lw:si, te,...,tw:si:te,\*, lw,...,te,,\*

【図 2 4】

a-Glc-4CとStereo code(CH2→H, OH→OH)を比較

a-Glc-4C

StereoCH2→H, OH→OH)

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C.,*si:tw:te,si.,*tw:si:te,OH.,te:tw:si*&l:si:tw,OH,...OH,*,OH,...*
7      A*B:B*B*C:C:C,*te:tw:si,OH,*te:si:tw,te.,tw:si:te*&l:si:te,OH,...tw:H:H,*,OH,...OH,...*
```

a-Glc-1C

StereoCH2→H, OH→OH)

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C.,*te:si:tw,te.,*te:tw:si,OH.,tw:si:te*&l:te:si,OH,...OH,*,OH,...*
7      A*B:B*B*C:C:C,*si:te:tw,OH,*tw:te:si,te.,te:tw:si*&l:tw:si,OH,...tw:H:H,*,OH,...OH,...*
```

a-Glc-14B

StereoCH2→H, OH→OH)

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C.,*si:tw:te,fo.,*tw:si:te,OH.,tw:si:te*&l:ei:fo,OH,...OH,*,OH,...*
7      A*B:B*B*C:C:C,*si:te:tw,OH,*ze:ei:fo,te.,ze:fo:ei*&l:si:te,OH,...tw:H:H,*,OH,...OH,...*
```

a-Glc-14TB

StereoCH2→H, OH→OH)

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C.,*se:th:el,th.,*tw:si:te,OH.,tw:si:te*&l:se:th,OH,...OH,*,OH,...*
7      A*B:B*B*C:C:C,*se:el:th,OH,*el:se:th,on.,el:th:se*&l:si:te,OH,...tw:H:H,*,OH,...OH,...*
```

b-Glc-4C

StereoCH2→H, OH→OH)

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C.,*si:tw:te,si.,*tw:si:te,OH.,te:si:tw*&l:si:tw,OH,...OH,*,OH,...*
7      A*B:B*B*C:C:C,*si:te:tw,OH,*te:si:tw,te.,tw:si:te*&l:si:te,OH,...tw:H:H,*,OH,...OH,...*
```

a-Gal-4C

StereoCH2→H, OH→OH)

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C.,*si:te:tw,si.,*tw:si:te,OH.,te:tw:si*&l:si:tw,OH,...OH,*,OH,...*
7      A*B:B*B*C:C:C,*te:tw:si,OH,*te:si:tw,te.,tw:si:te*&l:te:si,OH,...tw:H:H,*,OH,...OH,...*
```

a-Gal-1C

StereoCH2→H, OH→OH)

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C.,*te:tw:si,te.,*te:tw:si,OH.,tw:si:te*&l:te:si,OH,...OH,*,OH,...*
7      A*B:B*B*C:C:C,*si:te:tw,OH,*tw:te:si,te.,te:tw:si*&l:si:tw,OH,...tw:H:H,*,OH,...OH,...*
```

a-Man-4C

StereoCH2→H, OH→OH)

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C.,*si:tw:te,si.,*tw:si:te,OH.,te:tw:si*&l:tw:si,OH,...OH,*,OH,...*
7      A*B:B*B*C:C:C,*te:si:tw,OH,*te:si:tw,te.,tw:si:te*&l:si:te,OH,...tw:H:H,*,OH,...OH,...*
```

a-Man-1C

StereoCH2→H, OH→OH)

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C.,*te:si:tw,te.,*te:tw:si,OH.,tw:si:te*&l:si:te,OH,...OH,*,OH,...*
7      A*B:B*B*C:C:C,*si:tw:te,OH,*tw:te:si,te.,te:tw:si*&l:tw:si,OH,...tw:H:H,*,OH,...OH,...*
```



【図 2 5】

a-Glc-4CとConfiguration codeを比較

a-Glc-4C

Configuration

6 A\*B:B\*B\*B\*C:C:C,C.,\*si:tw:te,si,,\*si:te:tw,si,,si:te:tw\*si:tw:te,si,...si,\*,si,...\*  
7 A\*B:B\*C:C:C,\*si:te:tw,si,\*si:tw:te,si,,si:te:tw\*si:te:tw,si,...si:tw:te,\*,si,...si,,\*

a-Glc-1C

Configuration

6 A\*B:B\*B\*B\*C:C:C,C.,\*si:tw:te,si,,\*si:te:tw,si,,si:te:tw\*si:tw:te,si,...si,\*,si,...\*  
7 A\*B:B\*C:C:C,\*si:te:tw,si,\*si:tw:te,si,,si:te:tw\*si:te:tw,si,...si:tw:te,\*,si,...si,,\*

a-Glc-14B

Configuration

6 A\*B:B\*B\*B\*C:C:C,C.,\*si:tw:te,si,,\*si:te:tw,si,,si:te:tw\*si:tw:te,si,...si,\*,si,...\*  
7 A\*B:B\*C:C:C,\*si:te:tw,si,\*si:tw:te,si,,si:te:tw\*si:te:tw,si,...si:tw:te,\*,si,...si,,\*

a-Glc-14TB

Configuration

6 A\*B:B\*B\*B\*C:C:C,C.,\*si:tw:te,si,,\*si:te:tw,si,,si:te:tw\*si:tw:te,si,...si,\*,si,...\*  
7 A\*B:B\*C:C:C,\*si:te:tw,si,\*si:tw:te,si,,si:te:tw\*si:te:tw,si,...si:tw:te,\*,si,...si,,\*

b-Glc-4C

Configuration

6 A\*B:B\*B\*B\*C:C:C,C.,\*si:tw:te,si,,\*si:te:tw,si,,si:tw:te\*si:tw:te,si,...si,\*,si,...\*  
7 A\*B:B\*C:C:C,\*si:te:tw,si,\*si:tw:te,si,,si:te:tw\*si:te:tw,si,...si:te:tw,\*,si,...si,,\*

a-Gal-4C

Configuration

6 A\*B:B\*B\*B\*C:C:C,C.,\*si:te:tw,si,,\*si:te:tw,si,,si:te:tw\*si:tw:te,si,...si,\*,si,...\*  
7 A\*B:B\*C:C:C,\*si:te:tw,si,\*si:tw:te,si,,si:te:tw\*si:tw:te,si,...si:te:tw,\*,si,...si,,\*

a-Gal-1C

Configuration

6 A\*B:B\*B\*B\*C:C:C,C.,\*si:te:tw,si,,\*si:te:tw,si,,si:te:tw\*si:tw:te,si,...si,\*,si,...\*  
7 A\*B:B\*C:C:C,\*si:te:tw,si,\*si:tw:te,si,,si:te:tw\*si:tw:te,si,...si:te:tw,\*,si,...si,,\*

a-Man-4C

Configuration

6 A\*B:B\*B\*B\*C:C:C,C.,\*si:tw:te,si,,\*si:te:tw,si,,si:te:tw\*si:te:tw,si,...si,\*,si,...\*  
7 A\*B:B\*C:C:C,\*si:tw:te,si,\*si:tw:te,si,,si:te:tw\*si:te:tw,si,...si:te:tw,\*,si,...si,,\*

a-Man-1C

Configuration

6 A\*B:B\*B\*B\*C:C:C,C.,\*si:tw:te,si,,\*si:te:tw,si,,si:te:tw\*si:te:tw,si,...si,\*,si,...\*  
7 A\*B:B\*C:C:C,\*si:tw:te,si,\*si:tw:te,si,,si:te:tw\*si:te:tw,si,...si:te:tw,\*,si,...si,,\*

【図 2 6】

a-Glc-4C-chainとStereo codeを比較

a-Glc-4C-chain

Stereo

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C.C.,*si:tw:te,te,,*tw:si:te,si,,*te:si:tw,si,,*te:fi,th,,*
7      A*B*C:C*te:tw:si,*te:si:tw,el,*tw:si:te,te,,*si:te:tw,tw,,*si:tw:te,si,,*si,,,*
```

a-Glc-4C-chain-linear

Stereo

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C.C.,*si:tw:te,te,,*si:te:tw,si,,*si:tw:te,te,,*se:tw,fi,,*
7      A*B*C:C*se:ze:th,*si:tw:te,on,*si:te:tw,tw,,*si:te:tw,tw,,*si:tw:te,si,,*si,,,*
```

a-Glc-1C-chain

Stereo

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C.C.,*te:si:tw,ni,,*te:tw:si,si,,*tw:te:si,si,,*si:tw,tw,,*
7      A*B*C:C*si:te:tw,*tw:te:si,te,*te:tw:si,te,,*te:tw:si,tw,,*si:tw:te,fo,,*te,,,*
```

a-Glc-1C-chain-Hbond

Stereo

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C.C.,*te:si:tw,tw,,*si:te:tw,se,,*tw:te:si,el,,*ni:th,fo,,*
7      A*B*C:C*ni:on:fi,*tw:te:si,ze,*si:te:tw,th,,*te:tw:si,th,,*si:tw:te,te,,*el,,,*
```

a-Gal-4C-chain

Stereo

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C.C.,*si:te:tw,el,,*tw:si:te,te,,*te:si:tw,si,,*te:fi,th,,*
7      A*B*C:C*te:tw:si,*te:si:tw,te,*tw:te:si,te,,*si:te:tw,tw,,*si:tw:te,si,,*tw,,,*
```

a-Gal-4C-chain-linear

Stereo

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C.C.,*si:te:tw,te,,*si:te:tw,el,,*si:tw:te,ni,,*ei:tw,fi,,*
7      A*B*C:C*ei:ze:fo,*si:tw:te,on,*si:tw:te,on,,*si:te:tw,th,,*si:tw:te,si,,*tw,,,*
```

a-Man-4C-chain

Stereo

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C.C.,*si:tw:te,el,,*tw:si:te,si,,*te:tw:si,ni,,*te:fi,si,,*
7      A*B*C:C*te:si:tw,*te:si:tw,te,*tw:si:te,on,,*si:te:tw,tw,,*si:tw:te,se,,*tw,,,*
```

a-Man-4C-chain-linear

Stereo

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C.C.,*si:tw:te,el,,*si:te:tw,se,,*se:el:th,el,,*fo:te,ei,,*
7      A*B*C:C*fo:ze:ei,*se:th:el,ze,*si:te:tw,th,,*si:te:tw,th,,*si:tw:te,si,,*tw,,,*
```

CANOST

```
6      C2*C1:Q1:H:H*C1:Q1:H,H.,*C1:Q1:H,H.,*C1:Q1:H,H.,*V1:Q1:H,H.,*QD:H,H.,*
7      QD*V1*C1:H*C1:Q1:H,*C1:Q1:H,H.,*C1:Q1:H,H.,*C2:Q1:H,H.,*Q1:H,H.,*H,,,*
```

【図 2 7】

a-Glc-4C-chainとStereo code(CH2→H, OH→OH)を比較

a-Glc-4C-chain

Stereo(CH2→H, OH→OH)

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C,,*si:lw:te,OH,,*tw:si:te,OH,,*te:si:tw,OH,,*te:fi,OH,,*
7      A*B*C:C*te:tw:si,*te:si:tw,OH,*tw:si:te,OH,,*si:te:tw,OH,,*si:H:H,OH,,*OH,,*
```

a-Glc-4C-chain-linear

Stereo(CH2→H, OH→OH)

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C,,*si:lw:te,OH,,*si:te:tw,OH,,*si:tw:te,OH,,*se:tw,OH,,*
7      A*B*C:C*se:ze:th,*si:tw:te,OH,*si:te:tw,OH,,*si:te:tw,OH,,*si:H:H,OH,,*OH,,*
```

a-Glc-1C-chain

Stereo(CH2→H, OH→OH)

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C,,*te:si:tw,OH,,*te:tw:si,OH,,*tw:te:si,OH,,*si:tw,OH,,*
7      A*B*C:C*si:te:tw,*tw:te:si,OH,*te:tw:si,OH,,*te:tw:si,OH,,*si:H:H,OH,,*OH,,*
```

a-Glc-1C-chain-Hbond

Stereo(CH2→H, OH→OH)

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C,,*te:si:tw,OH,,*si:te:tw,OH,,*tw:te:si,OH,,*ni:th,OH,,*
7      A*B*C:C*ni:on:fi,*tw:te:si,OH,*si:te:tw,OH,,*te:tw:si,OH,,*si:H:H,OH,,*OH,,*
```

a-Gal-4C-chain

Stereo(CH2→H, OH→OH)

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C,,*si:te:tw,OH,,*tw:si:te,OH,,*te:si:tw,OH,,*te:fi,OH,,*
7      A*B*C:C*te:tw:si,*te:si:tw,OH,*te:tw:si,OH,,*si:te:tw,OH,,*si:H:H,OH,,*OH,,*
```

a-Gal-4C-chain-linear

Stereo(CH2→H, OH→OH)

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C,,*si:te:tw,OH,,*si:te:tw,OH,,*si:tw:te,OH,,*ej:tw,OH,,*
7      A*B*C:C*ei:ze:fo,*si:tw:te,OH,*si:tw:te,OH,,*si:te:tw,OH,,*si:H:H,OH,,*OH,,*
```

a-Man-4C-chain

Stereo(CH2→H, OH→OH)

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C,,*si:lw:te,OH,,*tw:si:te,OH,,*te:tw:si,OH,,*te:fi,OH,,*
7      A*B*C:C*te:si:tw,*te:si:tw,OH,*tw:si:te,OH,,*si:te:tw,OH,,*si:H:H,OH,,*OH,,*
```

a-Man-4C-chain-linear

Stereo(CH2→H, OH→OH)

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C,,*si:tw:te,OH,,*si:te:tw,OH,,*se:el:th,OH,,*fo:te,OH,,*
7      A*B*C:C*fo:ze:ei,*se:th:el,OH,*si:te:tw,OH,,*si:te:tw,OH,,*si:H:H,OH,,*OH,,*
```

CANOST

```
6      C2*C1:Q1:H:H*C1:Q1:H,H,,*C1:Q1:H,H,*C1:Q1:H,H,*V1:Q1:H,H,*QD:H,H,*
7      QD*V1*C1:H*C1:Q1:H,*C1:Q1:H,H,*C1:Q1:H,H,*C2:Q1:H,H,*Q1:H,H,*H,...*
```

【図 2 8】

a-Glc-4C-chainとConfiguration codeの比較

a-Glc-4C-chain

Configuration

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C.,*si:tw:te,si.,*si:te:tw,si.,*si:tw:te,si.,*si:ze,si.,*
7      A*B*C:C*si:te:tw,*si:tw:te,si,*si:te:tw,si.,*si:te:tw,si.,*si:tw:te,si.,*si.,*
```

a-Glc-4C-chain-linear

Configuration

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C.,*si:tw:te,si.,*si:te:tw,si.,*si:tw:te,si.,*si:ze,si.,*
7      A*B*C:C*si:te:tw,*si:tw:te,si,*si:te:tw,si.,*si:te:tw,si.,*si:tw:te,si.,*si.,*
```

a-Glc-1C-chain

Configuration

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C.,*si:tw:te,si.,*si:te:tw,si.,*si:tw:te,si.,*si:ze,si.,*
7      A*B*C:C*si:te:tw,*si:tw:te,si,*si:te:tw,si.,*si:te:tw,si.,*si:tw:te,si.,*si.,*
```

a-Glc-1C-chain-Hbond

Configuration

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C.,*si:tw:te,si.,*si:te:tw,si.,*si:tw:te,si.,*si:ze,si.,*
7      A*B*C:C*si:te:tw,*si:tw:te,si,*si:te:tw,si.,*si:te:tw,si.,*si:tw:te,si.,*si.,*
```

a-Gal-4C-chain

Configuration

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C.,*si:te:tw,si.,*si:te:tw,si.,*si:tw:te,si.,*si:ze,si.,*
7      A*B*C:C*si:te:tw,*si:tw:te,si,*si:tw:te,si.,*si:te:tw,si.,*si:tw:te,si.,*si.,*
```

a-Gal-4C-chain-linear

Configuration

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C.,*si:te:tw,si.,*si:te:tw,si.,*si:tw:te,si.,*si:ze,si.,*
7      A*B*C:C*si:te:tw,*si:tw:te,si,*si:tw:te,si.,*si:te:tw,si.,*si:tw:te,si.,*si.,*
```

a-Man-4C-chain

Configuration

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C.,*si:tw:te,si.,*si:te:tw,si.,*si:te:tw,si.,*si:ze,si.,*
7      A*B*C:C*si:tw:te,*si:tw:te,si,*si:te:tw,si.,*si:te:tw,si.,*si:tw:te,si.,*si.,*
```

a-Man-4C-chain-linear

Configuration

```
6      A*B:B:B*B*C:C:C,C.,*si:tw:te,si.,*si:te:tw,si.,*si:te:tw,si.,*si:ze,si.,*
7      A*B*C:C*si:tw:te,*si:tw:te,si,*si:te:tw,si.,*si:te:tw,si.,*si:tw:te,si.,*si.,*
```

CANOST

```
6      C2*C1:Q1:H:H*C1:Q1:H,H.,*C1:Q1:H,H.,*C1:Q1:H,H.,*V1:Q1:H,H.,*QD:H,H.,*
7      QD*V1*C1:H*C1:Q1:H,*C1:Q1:H,H.,*C1:Q1:H,H.,*C2:Q1:H,H.,*Q1:H:H,H.,*H.,*
```

【図 2 9】

1Br4Cl\_butadiene isomersの比較

CANOST

Br LB\*D1:D1;H\*D1;H,\*D1;H,\*LC;H,\*

Cl LC\*D1:D1;H\*D1;H,\*D1;H,\*LB;H,\*

1E3E1Br4Cl\_butadiene

Stereo

Br A\*B\*C:C\*si;ze,\*si;ze,\*si;ze,\*

Cl A\*B\*C:C\*si;ze,\*si;ze,\*si;ze,\*

Configuration

Br A\*B\*C:C\*si;ze,\*si;ze,\*si;ze,\*

Cl A\*B\*C:C\*si;ze,\*si;ze,\*si;ze,\*

1E3Z1Br4Cl\_butadiene

Stereo

Br A\*B\*C:C\*si;ze,\*si;ze,\*ze:si,\*

Cl A\*B\*C:C\*ze:si,\*si;ze,\*si;ze,\*

Configuration

Br A\*B\*C:C\*si;ze,\*si;ze,\*ze:si,\*

Cl A\*B\*C:C\*ze:si,\*si;ze,\*si;ze,\*

1Z3E1Br4Cl\_butadiene

Stereo

Br A\*B\*C:C\*ze:si,\*si;ze,\*si;ze,\*

Cl A\*B\*C:C\*si;ze,\*si;ze,\*ze:si,\*

Configuration

Br A\*B\*C:C\*ze:si,\*si;ze,\*si;ze,\*

Cl A\*B\*C:C\*si;ze,\*si;ze,\*ze:si,\*

1Z3Z1Br4Cl\_butadiene

Stereo

Br A\*B\*C:C\*ze:si,\*si;ze,\*ze:si,\*

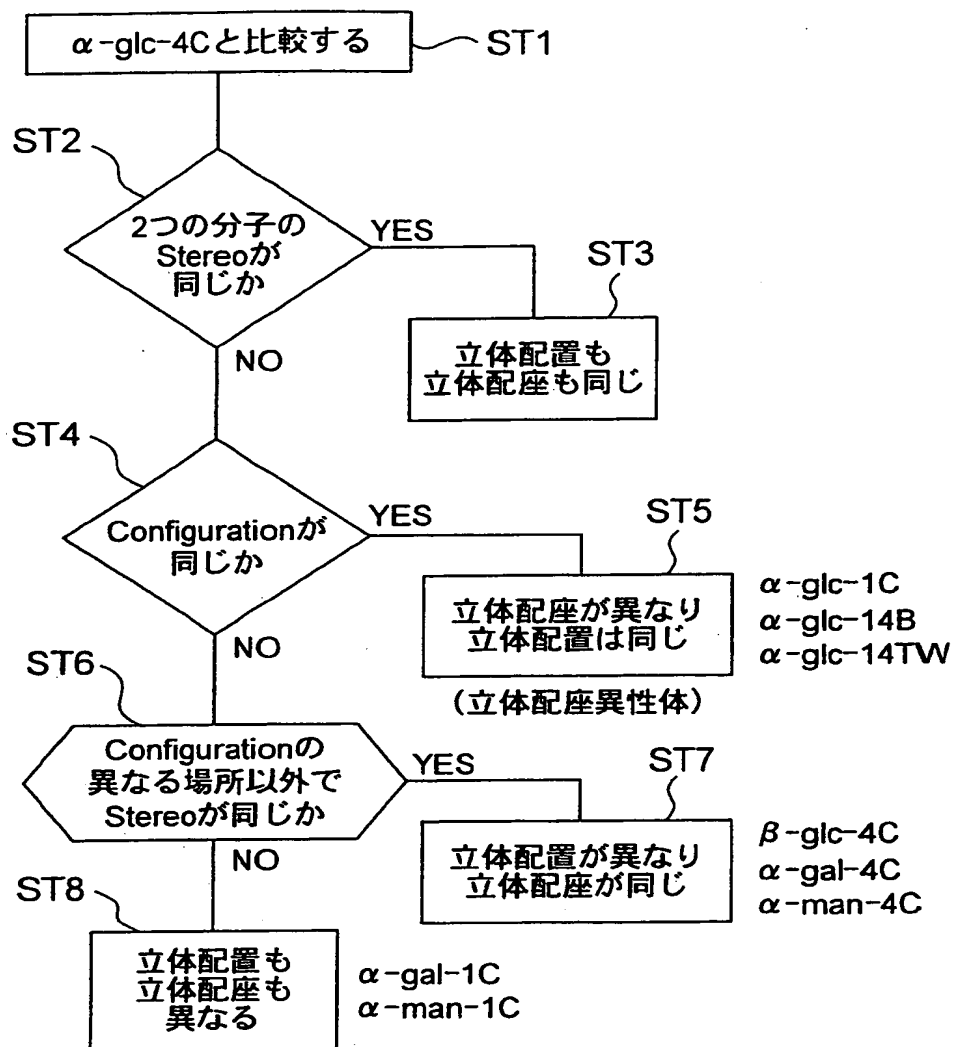
Cl A\*B\*C:C\*ze:si,\*si;ze,\*ze:si,\*

Configuration

Br A\*B\*C:C\*ze:si,\*si;ze,\*ze:si,\*

Cl A\*B\*C:C\*ze:si,\*si;ze,\*ze:si,\*

【図 30】



【書類名】 要約書

【要約】

【課題】 例えばNMRの化学シフト予測等に適用可能であり、立体配座や立体配置等の分子の立体構造環境の情報をコンピュータに読みとり可能に、規範的にコード化可能な分子のコード化方法を提供する。

【解決手段】 分子を構成する複数の原子の個々の原子の回りの立体化学を取り入れて分子をコード化する分子の立体化学コード化方法であって、順々に原子を階位に分類し、同じ階位に属する複数の原子を互いに順位付けするための所定の優先順位規則を設定し、複数の原子の間の結合関係を表すように低階位から高階位に向かって分子ツリー体を形成し、着目する第 $(n+3)$ 階位の原子と、第 $(n+2)$ 階位の原子と、前記第 $(n+2)$ 階位の原子と、第 $(n+1)$ 階位の原子と、第 $n$ 階位の原子からなるグループに対し、二面角を求め、二面角の大きさに応じて所定の角度分割規則に従って定義した角度記号に置換し、着目する第 $(n+3)$ 階位の原子に記号付与し、分子ツリー体を一列の文字列で表記するための所定の線形表記規則を設定し、分子ツリー体に対応させて線形表記して、スタート原子に対して分子の立体配座と立体配置を表す立体化学に関するコードを作成する。

【選択図】 図30

出 願 人 履 歴 情 報

識別番号 [0 0 0 0 0 6 7 9 2]

1. 変更年月日 1 9 9 0 年 8 月 2 8 日  
[変更理由] 新規登録  
住 所 埼玉県和光市広沢 2 番 1 号  
氏 名 理化学研究所



出 願 人 履 歴 情 報

識別番号 [396020800]

1. 変更年月日	1998年 2月24日
[変更理由]	名称変更
住 所	埼玉県川口市本町4丁目1番8号
氏 名	科学技術振興事業団

